

N° d'ordre:

THÈSE

présentée pour obtenir
LE TITRE DE DOCTEUR
DE L'INSTITUT NATIONAL POLYTECHNIQUE
DE TOULOUSE

École doctorale: EDyF
Spécialité: Dynamique des Fluides

Par Karine Truffin

SIMULATION AUX GRANDES ÉCHELLES
ET IDENTIFICATION ACOUSTIQUE DES TURBINES À GAZ
EN RÉGIME PARTIELLEMENT PREMELANGÉ.

Soutenance le 17 mai 2005 devant le jury composé de:

Mme. Bénédicte Cuenot	Directrice de thèse
M. Luc Vervisch	Rapporteur
M. Pascal Bruel	Rapporteur
M. Michel Cazalens	Examineur
M. Roland Borghi	Examineur
M. Thierry Poinsot	Examineur

Thèse financée par DGA-CNRS, préparée au CERFACS¹ en collaboration
avec SNECMA-Moteurs.

1. 42, av. Gaspard Coriolis, 31057 Toulouse Cedex 1, France

Remerciements

Tout d'abord, je remercie la DGA pour m'avoir accordé cette bourse DGA / CNRS.

Je tiens à exprimer ma profonde reconnaissance à Thierry Poinot pour son encadrement tout au long de ces trois années. Par son charisme, son dynamisme et sa passion pour la combustion, il insuffle l'envie et l'énergie à son équipe. Il s'est montré très disponible pour toutes mes questions et problèmes à résoudre. Il a pris le temps de relire et corriger les articles et ce manuscrit. Enfin, il m'a beaucoup appris pour évoluer à la fois dans le monde de la recherche et de l'industrie.

Je remercie également Bénédicte Cuenot, directrice de cette thèse, pour m'avoir fait confiance et laissée toute liberté dans mes initiatives. Elle contribue énormément à la qualité des recherches, à l'exploitation des acquis... et à la bonne humeur générale.

Je souhaite naturellement remercier Luc Vervisch², Pascal Bruel³ pour avoir accepté d'être rapporteurs et Roland Borghi⁴, Michel Cazalens⁵ pour avoir évalué mon travail.

Je tiens à exprimer toute ma gratitude à l'équipe CSG, qui chaque jour se donne la peine de gérer les problèmes informatiques avec une redoutable efficacité, de résoudre nos tracas et répondre à nos caprices avec élégance. Merci également au travail et à la gentillesse de l'administration, Marie, Michèle, Chantal, Nicole, Brigitte et Dominique.

Le CERFACS est un lieu de travail exceptionnel, qui accueille chaque année de nombreux thésards et post-docs. C'est avec la plupart d'entre eux que j'ai pu évoluer et trouver ma voie avec beaucoup de plaisir : Laurent Selle et Ghislain Lartigue, aussi drôles qu'insupportables, m'ont beaucoup appris, de par leur curiosité scientifique; merci à Laurent Gicquel, pour le temps qu'il m'a accordé mais aussi pour les moments d'évasion, à parler plongée; Yannick Sommerer qui a bien souvent rendu l'intégration des développements numériques moins fastidieuse. Merci à Eleonore Riber (Leo) qui humainement m'a témoigné beaucoup de confiance, qui m'a aussi convertie (momentanément!) au footing, et fait partager des moments de vie et de fous rire; Gabriel Staffelbach (alias Pablo, Mini-Moi ou Mr le consultant informatique), accueilli stagiaire, je le trouvais bien maladroit, depuis nous nous sommes liés d'une amitié complice; Patrick Schmitt ("So ist das Leben!") avec qui j'ai pu avoir des discussions animées et pleines d'idées fructueuses; Laurent Benoit, inoubliable pour ses exposés d'histoire (quelle culture!), son enthousiasme pour la stratégie politico-militaire et ses coups de gueule contre l'ordinateur; Charles Martin, motard

2. Professeur à l'I.N.S.A. de Rouen

3. Chargé de Recherche à l'université de Pau

4. Professeur à l'ESM2, Marseille

5. Snecma Moteurs, W/YKCM - Département Aero-Combustion, site Villaroche

au grand cœur, Jean-Baptiste Mossa, chasseur d'images, Antoine Dauplain, passé maître dans les arts du Lindy hop, de la fabrication de bombes à eau ou dans la provocation de cris de frayeur; Merci à Aloïs Sengissen, pour m'avoir initiée au Canyoning (c'est quand qu'on recommence?), et Ludovic Thobois pour avoir lancé les soirées Carting; et puis merci à Marta et Roberto (Un gran abrazo...tutti e a due!;-) je, je, je), Céline Prière, Matthieu Boileau (le freesbee, ça vous gagne!), Alexis Giauque, Valérie Auffray (peuchère!...), Sébastien Roux (dont je n'oublierai pas le Gin), Stéphane Pascaud, Simon Mendez, Léa Artal, Alexandre Beer, Mauro Porta et Florent Duchaine avec lesquels j'ai passé des moments très agréables. Je remercie également (dans le désordre) Nicolas Lamarque, Guillaume Boudier et Jacques Lavedrine pour avoir supporté avec patience et humour mes sautes d'humeur pendant les derniers mois.

À Anne...

Résumé

Dans les foyers aéronautiques, une des stratégies adoptée pour réduire l'émission de polluants et faciliter la stabilisation de la flamme, est d'injecter séparément les réactifs dans la chambre de combustion. L'objectif de cette thèse est de développer et de valider l'approche LES (Large Eddy Simulation) de la combustion turbulente partiellement prémélangée dans les turbines à gaz. La conception des nouvelles chambres de combustion moins polluantes, passe par la compréhension de phénomènes instationnaires, tels que les instabilités de combustion. Dans ce contexte, des méthodes pour identifier la réponse de la chambre aux perturbations acoustiques, responsables des instabilités, sont étudiées et améliorées.

Dans un premier temps, une étude bibliographique rappelle les caractéristiques essentielles de trois types de combustion rencontrés dans les turbines à gaz (prémélange, diffusion, prémélange partiel). Un état de l'art sur la réduction des schémas cinétiques est proposé à l'issue duquel des schémas cinétiques réduits à deux et quatre étapes sont présentés. Ces schémas ont été développés et validés dans cette thèse. Le modèle de flamme épaissie dynamiquement a été spécialement étendue dans cette thèse aux schémas cinétiques multi-réactions (DTF_MS) en prenant en compte les termes sources de toutes les espèces. Il est intégré dans le code LES AVBP. Ces modèles de combustion doivent prendre en compte les spécificités de la réaction et de l'écoulement: zones de mélange, prémélange à richesse variable, interactions flamme/turbulence, émission de polluants.

La deuxième partie décrit les méthodes de mesure des fonctions de transfert. Deux méthodes (FTF et ITM), couramment utilisées numériquement et expérimentalement pour identifier la réponse de la flamme, sont comparées. La formulation FTF est améliorée pour être pleinement compatible avec les approches ITM dans le cadre de l'acoustique linéaire 1D.

La troisième partie présente l'étude d'un brûleur propane/air, installé au laboratoire EM2C(Ecole Centrale, Paris). Cette partie représente un premier cas de validation de la LES réactive dans une configuration académique non prémélangée. Les nombreuses comparaisons avec l'expérience permettent de vérifier la qualité de la LES et de mettre en évidence les points à améliorer, en particulier la modélisation de la cinétique. L'évaluation de la réponse instationnaire de la flamme soumise à des perturbations acoustiques est réalisée en comparant les moyennes de phase LES/expérience et en déterminant les fonctions de transfert. Les résultats justifient l'utilisation des méthodes FTF étendues.

Enfin, les simulations d'un prototype de brûleur industriel (installé au DLR Institut Technologique de Propulsion à Cologne) ont permis de valider différents points. Tout d'abord, elles montrent que les modèles de combustion sont applicables à une géométrie aussi complexe. Ensuite, elles permettent une première validation des modèles développés dans cette thèse. Les champs moyens obtenus avec deux schémas cinétiques (deux et quatre étapes) sont comparés. Enfin, elles rendent compte de phénomènes instationnaires complexes, tels que les PVC ("Precessing Vortex Core"), les couplages acoustique/hydrodynamique et les instabilités de combustion.

MOTS CLES:

- Simulation des Grandes Echelles
- Combustion turbulente partiellement prémélangée
- Identification acoustique des brûleurs
- Instabilités de combustion
- Schémas cinétiques
- Foyers aéronautiques

Abstract

To reduce pollutant emissions and to better stabilize the flame in modern aeroengine combustors, a common strategy is to inject fuel and oxidizer separately. The aim of this thesis is first to develop and to validate the large eddy simulation (LES) of turbulent partially premixed combustion in gas turbines. The design of new combustion chambers with low level emissions requires the understanding of unsteady phenomena, like combustion instabilities. In this study, two methods for identifying the chamber response to acoustic perturbations are investigated.

In the first part, the three types of combustion (premixed, diffusion partially premixed), which are found in combustors are briefly described. Then a state of the art in kinetic scheme reduction techniques is given, followed by the description of a 2-step and a 4-step reduced kinetic schemes, that have been developed and validated for this study. Then, a dynamically thickened flame model (DTF_MS) has been specially developed in the thesis for multi-step reaction schemes. It has been integrated in the LES code AVBP. These models take into account the features of the flow and of the reaction: mixing zones, variable equivalence ratios, flame/turbulence interactions, pollutant emissions.

In the second part, methods for measuring flame transfer functions are detailed. Two methods (FTF and ITM) are usually used numerically and experimentally, to identify the unsteady flame response. The FTF formulation is extended to be fully compatible with the approach ITM in the 1D linear acoustic analysis.

In the third part, a propane/air burner set up at EM2C laboratory (Ecole Centrale, Paris) is presented. This part is dedicated to the first validation of reactive LES in an academic non premixed configuration. The many comparisons with experiments are used to check the accuracy of LES and to evidence results that need to be improved. The evaluation of the response of the flame under acoustic forcing is realised comparing simulation and experiments in terms of phase average fields and flame transfer functions. Results show that extended FTF methods are needed.

Finally, simulations of the prototype of an industrial burner (installed in DLR Institute of Propulsion Technology) are used to validate some points. First, the combustion models can be applied in a complex geometry. Second, this part provides a first validation of the combustion models developed in this thesis. The mean fields obtained with two kinetic schemes (2 and 4 steps) are compared. Third, complex unsteady phenomena, like PVC ("precessing vortex core"), acoustics/hydrodynamics coupling and combustion instabilities, can be captured by LES.

KEYWORDS:

- Large Eddy Simulation
- Turbulent partially premixed combustion
- Acoustic identification of burners
- Combustion instabilities
- Kinetic schemes
- Aeroengine combustors

Table des matières

Nomenclature	14
1 Introduction	21
1.1 Contexte général	21
1.2 Objectifs de la thèse	22
1.3 Plan de thèse	30
I Étude bibliographique et méthodologie: la combustion turbulente partiellement prémélangée	33
2 La combustion turbulente	35
2.1 La combustion turbulente prémélangée	36
2.1.1 Flamme de prémélange laminaire	36
2.1.2 Influence de la turbulence	37
2.1.3 Régimes de combustion turbulente prémélangée	39
2.2 Modélisation de la combustion turbulente prémélangée	42
2.2.1 Modèles de type G-equation	42
2.2.2 Le modèle de flamme épaissie en LES TF-LES	45
2.3 La combustion turbulente non prémélangée et partiellement prémélangée	46
2.3.1 Configuration d'une flamme de diffusion	47

2.3.2	Influence de la turbulence	48
2.3.3	Le scalaire passif	48
2.3.4	La structure locale des flammelettes	49
2.3.5	Les régimes de combustion en diffusion	51
2.4	Modélisation de la combustion turbulente non prémélangée	53
2.4.1	Les méthodes Pdf utilisant l'hypothèse de chimie infiniment rapide	53
2.4.2	Les méthodes Pdf utilisant l'hypothèse de chimie non infiniment rapide	53
2.4.3	La combustion partiellement prémélangée: exemple de la flamme détachée (ou liftée)	54
3	Les schémas cinétiques réduits	59
3.1	Elements de thermochimie	60
3.1.1	Equilibre thermodynamique	60
3.1.2	Cinétique chimique	61
3.1.3	Température et vitesse laminaire de flamme	63
3.2	La thermochimie dans AVBP	63
3.2.1	Les variables thermodynamiques	63
3.2.2	Equation d'état	64
3.2.3	Les coefficients de transport	64
3.3	La combustion des hydrocarbures	65
3.3.1	Les schémas cinétiques complets	66
3.3.2	Développement d'un schéma cinétique réduit	66
3.4	Un exemple de schéma cinétique réduit à 2 étapes pour le propane: le schéma 2S-KT1	69
3.5	Un exemple de schéma cinétique réduit pour le méthane: le schéma à 4 étapes J&L	72
3.5.1	Description du mécanisme	72

3.5.2	Structure de la flamme	74
3.5.3	Influence de la richesse	77
4	La LES réactive dans AVBP	81
4.1	La LES réactive dans AVBP	82
4.1.1	Généralités sur la LES	82
4.1.2	Les équations de la LES	82
4.1.3	Les flux visqueux hors de la flamme	83
4.1.4	Fermeture des flux diffusifs	85
4.1.5	les flux visqueux dans un écoulement réactif	87
4.1.6	Le modèle de flamme épaissie dynamiquement DTF-LES	88
4.1.7	Extension du modèle DTF à un schéma cinétique réduit multi-étapes: DTF_MS	90
4.2	Les schéma numériques	91
4.3	Les conditions aux limites	92
II	Les méthodes de mesure des réponses d'écoulement à des excitations acoustiques par la LES	99
5	Comparaison et extension des méthodes pour l'identification acoustique des brûleurs: article	103
5.1	Introduction and configuration	105
5.2	Methods for system identification	107
5.2.1	Acoustics in reacting flows	107
5.2.2	Flame transfer function formulations (FTF)	108
5.2.3	Identification of transfer matrices (ITM)	110
5.2.4	The link between FTF and ITM methods	111

5.3	System identification for a laminar burner	113
5.3.1	Numerical tool and boundary conditions	113
5.3.2	Computation of a laminar Bunsen-type flame	113
5.4	Results using a specific FTF model: the $n - \tau$ approach	114
5.5	Extended FTF models	116
5.6	Equivalence of ITM and extended FTF methods	117
5.7	Conclusion	118
5.8	Tables	120
5.9	Figures	120

III Application à une configuration complète de laboratoire, le brûleur ICLEAC 133

6	Installation expérimentale, configuration	135
6.1	Contexte de l'étude	136
6.2	Installation expérimentale	136
6.2.1	Présentation de la géométrie	136
6.2.2	Caractéristiques de la chambre de combustion	138
6.2.3	Données expérimentales disponibles	138
6.2.4	Caractérisation expérimentale des régimes de combustion	143
6.3	Description des calculs numériques	145
6.3.1	Domaine de calcul	145
6.3.2	Les conditions aux limites	145
6.3.3	Le schéma cinétique	146
6.3.4	Le maillage	147
6.3.5	Le calcul pulsé	149

6.4	Calcul de la fonction de transfert du brûleur	150
6.4.1	Fonction de cohérence	151
6.4.2	Test à priori de l'influence d'un bruit blanc	152
6.4.3	Test à priori de l'influence d'un bruit cohérent	156
7	Résultats sans excitation	159
7.1	Choix du maillage	160
7.2	Structure de la flamme décrochée	165
7.2.1	Caractérisation du régime de combustion	165
7.2.2	Caractérisations des différents types de flammes	165
7.3	Dynamique de la flamme	166
7.3.1	Stabilisation de la flamme	166
7.3.2	Influence des couches de mélange	171
7.3.3	Caractère tri-dimensionnel de la flamme	176
7.4	Comparaisons avec l'expérience	178
7.4.1	Vues longitudinales instantanées	178
7.4.2	Vues transverses instantanées	178
7.4.3	Champs moyens	182
8	Résultats avec excitation	187
8.1	Réponse de la flamme et du mélange à l'excitation acoustique	188
8.1.1	Analyse des champs instantanés	188
8.2	Moyennes de phases	189
8.3	Fonction de transfert de la flamme	194
8.3.1	Influence du coefficient de réflexion	194
8.3.2	Comparaison avec l'expérience	196

8.3.3	Application aux techniques ITM et FTF étendues	198
8.4	Conclusion	202
IV	Application à une configuration complète industrielle, le brûleur MO- LECULES	203
9	Les écoulements swirlés	205
9.1	Généralités	206
9.2	Les écoulements réactifs swirlés	206
9.2.1	Stabilisation de la flamme	207
9.3	Caractérisation des écoulements swirlés	209
9.3.1	Vortex breakdown	210
9.3.2	Precessing vortex core	211
10	Présentation de la géométrie	213
10.1	Le brûleur MOLECULES	214
10.2	La chambre de combustion	215
10.3	Données expérimentales disponibles	219
10.4	Maillage	220
11	Calcul sans combustion	223
11.1	Objectifs du calcul à froid	224
11.2	Conditions aux limites	224
11.3	Comparaison avec les résultats expérimentaux	227
11.3.1	Validation des conditions aux limites	227
11.4	Caractérisation de l'écoulement	228
11.5	Statistiques de l'écoulement dans la zone primaire	231

11.5.1	Profils de vitesse	231
11.5.2	Champs moyens de vitesse dans le plan transverse	236
11.6	Analyse des instationnarités	239
11.6.1	Analyse acoustique de la chambre	239
11.6.2	Precessing Vortex Core	241
11.7	Analyse spectrale	243
11.7.1	Mode acoustique	247
12	Calcul avec combustion	249
12.1	Présentation du régime de fonctionnement	250
12.2	Schéma cinétique pour le méthane	252
12.3	Stabilisation de la flamme	253
12.4	Vérification du modèle d'épaississement	259
12.5	Influence du schéma cinétique	260
12.5.1	Champs instantanés	260
12.5.2	Champs moyens	262
12.5.3	Limite de flammabilité	266
12.6	Analyse instationnaire	267
12.6.1	Analyse acoustique de la chambre	267
12.7	Dynamique de la flamme	269
12.7.1	Couplage combustion/acoustique	269
12.7.2	Structures instationnaires	270
12.8	Conclusion	273
13	Conclusion et perspectives	275
13.1	Présentation générale	275

13.2 Conclusion sur le brûleur Le Helley	276
13.3 Conclusions sur le brûleur ICLEAC	277
13.4 Conclusions sur le brûleur MOLECULES	278
Annexes	279
A Détection des structures cohérentes	281
A.1 Le Critère Q	281
A.2 Le critère de Jeong & Hussain	281
B Planches en couleur du brûleur MOLECULES	285
B.1 Ecoulement à froid	285
B.2 Ecoulement à chaud	287
Bibliographie	289
Index	303

Nomenclature

'	fluctuation acoustique
'	fluctuation de sous maille
^	amplitude des fluctuations
~	filtrage de Favre
β	exposant d'Arrhénius pour la température
\mathcal{F}	tenseur des flux
\mathbf{s}	vecteur des termes sources
\mathbf{w}	vecteur des variables conservatives
χ	dissipation scalaire de la fraction de mélange
$\Delta h_{f,k}^0$	chaleur de formation
Δ	taille du filtre LES
δ	épaisseur laminaire de flamme
δ_d	épaisseur diffusive de flamme
Δ_e	échelle du filtre pour TFLES
δ_L^0	épaisseur thermique
δ_r	épaisseur de réaction
δ_T	épaisseur turbulente de flamme
Δ_x	taille de la maille
Δ_i	taille caractéristique de la cellule au noeud i
\dot{m}_F	débit massique du carburant
$\dot{\omega}_T$	taux de dégagement de chaleur
$\dot{\Omega}_{T,0}$	taux de dégagement de chaleur global moyen
η_k	longueur de Kolmogorov
Γ	intégration des contributions au plissement
γ	rapport des chaleurs massiques

Γ_l	facteur sans dimension de la matrice de transfert
κ	courbure de la flamme
Λ	constante du modèle DTF
λ	conductivité thermique
λ	longueur d'onde acoustique
λ_2	critère de vorticit�
\mathcal{E}	�nergie totale non chimique conservative
\mathcal{H}	matrice de transfert reliant l'�plitude des ondes acoustiques
\mathcal{L}_M^d	longueur de Markstein
\mathcal{M}	matrice de transfert
\mathcal{M}_{kj}	esp�ce k dans la r�action j
\mathcal{O}_l	vecteur des termes sources dans les relations acoustiques de saut
\mathcal{Q}	chaleur de r�action
\mathcal{T}_l	matrice de transfert non chimique reliant l'amplitude des ondes
μ	viscosit� dynamique
ν	viscosit� cin�matique
ν_k	coefficient st�ochiom�trique
ν_t	viscosit� turbulente
Ω	taux de r�action du fuel modifi� pour DTF
ω	pulsation
Ω_0	maximum de Ω pour une flamme laminaire
$\overline{u^*}$	vitesse axiale moyenne conditionn�e
Φ	richesse
ϕ_u	phase de r�f�rence pour la vitesse
$\dot{\Omega}_T$	taux de d�gagement de chaleur global
$\dot{\Omega}'_T$	fluctuation du taux de d�gagement de chaleur global
ρ	masse volumique
ρ_1	masse volumique dans les gaz frais
ρ_k	masse volumique de l'esp�ce k
τ	d�lai ou temps de retard de flamme
τ_c	temps chimique
τ_f	temps de m�lange
τ_k	temps de Kolmogorov

τ_t	temps turbulent
τ_{ij}	tenseur des contraintes visqueuses
τ_{ij}^{sgs}	tenseur de Reynolds
θ	senseur pour l'épaississement DTF
ε	dissipation de l'énergie cinétique turbulente
φ	phase
Ξ	facteur de plissement de la flamme
ζ_k	potentiel chimique de l'espèce k
sgs	fluctuation de sous maille par rapport au filtrage de Favre
A	constante pre-exponentielle
A^+	amplitude de l'onde acoustique se propageant vers l'aval
A^-	amplitude de l'onde acoustique se propageant vers l'amont
A_L	surface de flamme normale à l'écoulement
A_T	surface totale de flamme
c	vitesse du son
C_F	constante du modèle DTF
C_p	chaleur massique à pression constante
C_s	constante de Smagorinsky
C_w	constante de WALE
$C_{p,k}$	chaleur massique à pression constante de l'espèce k
$C_{v,k}$	chaleur massique à volume constant de l'espèce k
C_v	chaleur massique à volume constant
C_{xy}	cohérence entre les signaux x et y
D_k	diffusivité moléculaire
D_t	diffusivité turbulente
D_{th}	diffusivité thermique
Da	nombre de Damköhler
E	fonction d'efficacité
E	énergie totale non chimique
E_a	énergie d'activation
e_c	énergie cinétique
$e_{s,k}$	énergie sensible de l'espèce k
e_s	énergie sensible

F	facteur d'épaississement de la flamme
F	fonction de transfert de flamme
f	fréquence
F_i^I	flux visqueux
F_i^V	flux non visqueux
F_i^{sgs}	flux de sous maille
F_{max}	maximum du facteur d'épaississement F
H	nombre de Helmholtz
h_s	enthalpie sensible
J_k^{sgs}	flux diffusif des espèces de sous maille
K	constante d'équilibre
k	index des espèces
k	nombre d'onde
k_j	constante de la réaction j
Ka	nombre de Karlovitz
L^{af}	distance entre le point a et la flamme
l_m	longueur de mélange
l_t	longueur intégrale de la turbulence
$L_{e,k}$	nombre de Lewis
M_{ij}	coefficients complexes de \mathcal{M}
N	nombre d'espèces
n	facteur d'amplification de flamme
n_k	exposants d'Arrhenius pour les espèces
nm_k	nombre de moles de l'espèces k
p	pression
p_0	pression de référence
P_r^t	nombre de Prandtl turbulent
pdf	fonction densité de probabilité
Pr	nombre de Prandtl
Q	critère de vorticit�
Q	d�bit massique
q	flux de chaleur
q^{sgs}	flux de chaleur de sous maille

q_j	taux d'avancement de la réaction j
R	constante des gaz parfaits
r	constante spécifique des gaz
R_a	coefficient de réflexion au point a
r_k	constante spécifique de l'espèce k
$Rand$	bruit aléatoire
Re	nombre de Reynolds
Re_t	nombre de Reynolds turbulent
S	nombre de swirl
S	surface
s	rapport des masses stœchiométriques
S_d	vitesse de déplacement de la flamme
S_L	vitesse laminaire de flamme
S_T	vitesse turbulente de flamme
$S_{c,k}$	nombre de Schmidt de l'espèce k
$S_{c,k}^t$	nombre de Schmidt turbulent
S_{ij}	tenseur des déformations
S_{xx}	densité spectrale de puissance
S_{xy}	densité spectrale de puissance croisée
St	nombre de Strouhal
T	température
t	temps
T_0	température de référence
T_1	température des gaz frais
T_2	température des gaz brûlés
T_{ad}	température adiabatique de flamme
u'	intensité turbulente
u'_{Δ_e}	fluctuation de vitesse à l'échelle Δ_e
u_i	vitesse
u'_k	fluctuation de vitesse associée aux échelles de Kolmogorov
u'_t	fluctuation de vitesse associée aux échelles intégrales
U_{deb}	vitesse débitante
V_{cell}	Volume de la cellule

W_k	Masse molaire de l'espèce k
x_i	coordonnées
X_k	fraction molaire de l'espèce k
Y_k	fraction massique de l'espèce k
Y_F^1	fraction massique de fuel dans les gaz frais
Y_F^2	fraction massique de fuel dans les gaz brûlés
z	fraction de mélange
$\dot{\omega}_k$	taux de réaction de l'espèce k
$J_{i,k}$	flux diffusif de l'espèce k
V_i^c	vitesse de correction
$V_{i,k}$	vitesse de diffusion de l'espèce k
–	filtrage LES
1	quantité dans les gaz frais
2	quantité dans les gaz brûlés
c	quantité au col sonique
l	quantité à gauche
r	quantité à droite

Chapitre 1

Introduction

1.1 Contexte général

Depuis les dix dernières années, l'efficacité des turbines à gaz a été accrue par l'augmentation de la pression et de la température de fonctionnement. Cette amélioration de l'efficacité a permis de réduire l'émission du CO₂, qui est considéré comme un des plus gros polluants dans les conférences de Kyoto. En contre partie, les efforts redoublent pour maintenir de faibles niveaux de Nox, puisque ses émissions augmentent exponentiellement avec la température dans les chambres de combustion. Ces efforts se traduisent par le développement de nouvelles technologies guidant la conception des moteurs. Les recherches actuelles se focalisent sur la réduction des polluants et l'efficacité de la combustion. Une stratégie pour atteindre ces objectifs est de brûler en pré-mélange pauvre plutôt qu'en diffusion. Cependant, une conséquence majeure de ce régime de fonctionnement est qu'il présente le risque de devenir instable. Le contrôle des instabilités de combustion est devenu un élément crucial dans le développement de systèmes de combustion efficaces et faiblement polluants.

Il y a vingt ans, des formules empiriques et des études expérimentales étaient utilisées pour la conception des moteurs. De nos jours le développement nécessite des résultats de plus en plus précis et rapides, c'est pourquoi les industriels prennent en compte les investigations réalisées avec les codes CFD dans lesquels le plus souvent des modèles doivent être implémentés pour étudier la combustion turbulente. La modélisation et la simulation numérique sont des outils indispensables pour comprendre les problèmes complexes. Un modèle est une façon simplifiée de décrire et prédire les phénomènes physiques. Pour rendre possible la production de systèmes réactifs avancés, des études préliminaires incluant des modèles simplifiés doivent être menées. Ce travail se concentre sur la compréhension de la combustion instationnaire dans des configurations

complexes, proches des foyers aéronautiques, et sur l'extension et la validation de modèles de combustion.

Cette thèse a été réalisée en liaison avec la société SNECMA Moteurs dans le cadre du Programme de Recherche Concerté en Combustion (PRCC) et de deux programmes européens: ICLEAC (Instability Control of Low Emission Aero-Engine Combustors) et MOLECULES (Modelling of Low Emission Combustors Using Large Eddy Simulations).

1.2 Objectifs de la thèse

Le calcul numérique des écoulements réactifs peut guider le design, la détermination des conditions opératoires et le choix de la composition du fuel des chambres de combustion modernes. Il est donc important de développer les capacités de prédiction de la simulation numérique. C'est l'objectif principal de cette thèse. Cette étude se focalise sur la compréhension des interactions entre l'écoulement dynamique, la chimie de la combustion et l'acoustique qui peuvent affecter les performances et les émissions de polluants des turbines à gaz industrielles. Les résultats ont été systématiquement confrontés aux mesures expérimentales. Cette collaboration avec les résultats expérimentaux (laboratoire EM2C à l'Ecole Centrale Paris et DLR Institute of Propulsion Technology à Cologne, Allemagne) a permis une approche approfondie vers la compréhension des phénomènes complexes liés à la combustion instationnaire.

La combustion dans les turboréacteurs, les turbines à gaz des centrales électriques, les moteurs à pistons, les brûleurs industriels peut être classée de différentes façons. La façon la plus commune est d'observer comment la zone de réaction est alimentée en combustible. La combustion peut alors être classée en trois catégories: la combustion prémélangée, la combustion non prémélangée et la combustion partiellement prémélangée. En combustion turbulente non prémélangée, le fuel et l'oxydant sont injectés séparément et c'est le mélange turbulent qui contrôle la combustion [12]. La combustion non prémélangée s'observe en pratique dans les moteurs Diesel et dans de nombreuses turbines à gaz industrielles. Dans les moteurs Diesel, le fuel est injecté sous forme de spray liquide et s'évapore au contact de l'air chaud à haute pression. L'air peut être préchauffé ou dilué par les gaz brûlés dans la zone de combustion. Au contraire, en combustion prémélangée les réactifs sont parfaitement mélangés avant de brûler. Dans ce cas, le taux de réaction est contrôlé par la propagation du front de flamme des gaz brûlés vers les gaz frais [145,200]. Par exemple, les moteurs à allumage commandé (moteurs équipés de bougies d'allumage: moteurs de voitures à essence) fonctionnent en prémélange. Les réactifs sont mélangés suffisamment longtemps pour qu'on puisse considérer que le mélange est homogène jusqu'au niveau moléculaire. L'énergie de

l'étincelle suffit à créer l'inflammation et la propagation d'une flamme de prémélange laminaire puis turbulente. Enfin, la combustion partiellement prémélangée peut-être observée lorsque le fuel et l'oxydant sont injectés séparément et ont le temps de se mélanger en partie avant de brûler. La combustion partiellement prémélangée peut-être choisie pour faciliter la stabilisation de la flamme, lorsque les réactifs se mélangent aux gaz brûlés dans la zone de recirculation. En outre, c'est une des stratégies choisies pour réduire la production de NOx dans le cas par exemple, de la combustion stratifiée. Dans de nombreux fours industriels, le fuel est partiellement prémélangé avant d'être injecté dans la chambre de combustion. C'est également le cas de nombreuses turbines à gaz. En effet, dans les chambres de combustion aéronautiques le carburant est injecté sous forme liquide puis s'évapore et se mélange à l'air sous l'effet de la turbulence avant de brûler. Du fait que le prémélange n'est que partiel, on observe les deux types de combustion (prémélange et diffusion). L'approche diphasique de l'injection du carburant n'est pas étudiée dans cette thèse, en revanche un des objectifs est de prendre en compte les variations de richesse. Une analyse de la combustion turbulente non prémélangée est donnée par Williams [201], Borghi [16], Libby et Williams[105], Bray et Peters [17], Peters [145], Poinot et Veynante [153]. Une description de la combustion turbulente prémélangée peut-être trouvée dans Kuo [94], Pope [159], Poinot et Veynante [153].

Un autre critère de classification est lié au rapport entre les échelles de temps de la chimie et de la turbulence. Les échelles temporelles de la turbulence diminuent lorsque l'intensité de la turbulence croît. Les échelles de temps chimique diminuent si la température augmente et inversement. La situation où les échelles de la turbulence sont petites et le temps chimique est grand est appelée combustion à chimie lente, alors que dans le cas de temps turbulents longs et de temps chimiques courts, la combustion est dite à chimie rapide. La cas de la chimie lente peut être rencontrée dans les brûleurs à faible émission en oxyde d'azote (NOx), dans lesquels la diminution de la température dans les gaz d'échappement permet l'existence de réactions chimiques lentes. De même dans les régions de post-combustion des moteurs à explosion, où la répartition de la température est homogène, la production d'NOx est faible. Cependant, dans la plupart des cas la chimie rapide est prépondérante, car la température élevée permet de mieux stabiliser la flamme. La Fig. 1.1 présente différents systèmes à combustion interne classés suivant ces deux critères.

La simulation complète de la combustion turbulente incluant tous les phénomènes physiques et chimiques, n'est pour le moment pas possible à cause de la disparité des échelles temporelles dues notamment à la chimie (Fig. 1.2). Bien que les calculateurs soient de plus en plus performants, en terme de rapidité et d'espace mémoire, leur puissance est encore très insuffisante. Des infor-

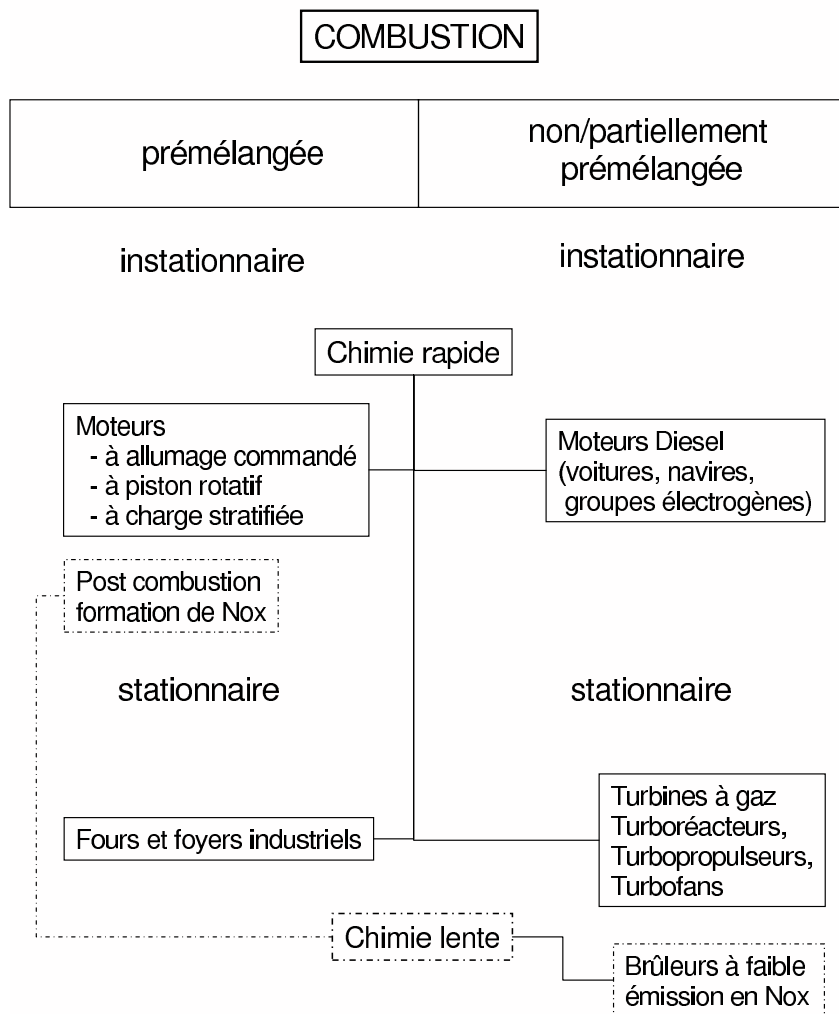


FIG. 1.1 – Classification de la combustion dans les systèmes à combustion interne.

mations détaillées sur la théorie de la turbulence, les écoulements turbulents et les écoulements turbulents réactifs peuvent être trouvés dans Libby and Williams [104], Poinot [153], Pope [160], Tennekes and Lumley [187] parmi d'autres.

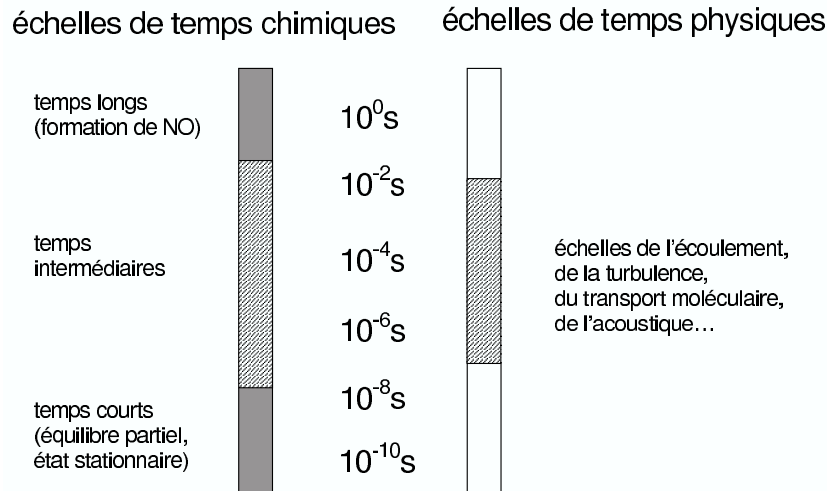


FIG. 1.2 – Les échelles de temps dans un écoulement réactif turbulent.

En considérant les besoins et les challenges dans ce domaine, ce travail s'articule en premier lieu autour de la modélisation de la combustion en prenant en compte la cinétique, la formation d'espèces intermédiaires, tel que CO, et les couplages instationnaires entre la flamme et la turbulence. La difficulté pour résoudre les écoulements turbulents combinée à la complexité de la cinétique chimique, font que la modélisation de la combustion turbulente est actuellement l'un des principaux problèmes à résoudre. Plusieurs points doivent être pris en compte par le modèle pour décrire la physique de la combustion turbulente: les interactions entre la chimie de la réaction et la turbulence, les domaines de validité, les effets instationnaires sources d'auto-allumages et d'extinctions locales, l'information contenue dans la chimie détaillée et par dessus tout, des temps de calcul raisonnables.

La modélisation numérique de la combustion s'appuie sur les données suivantes:

- les analyses asymptotiques qui permettent une estimation analytique des propriétés de la flamme,
- les mesures expérimentales,
- les cas tests simples qui permettent de comprendre les phénomènes basiques,
- la Simulation Numérique Directe qui permet d'extraire les données de toutes les échelles de la turbulence, qui ne peuvent pas être obtenues par l'expérience.

Pour calculer des écoulements réactifs turbulents dans le contexte de la LES (Large Eddy Simulation), la structure complexe de la flamme ne peut être résolue et des modèles de combustion sont

nécessaires pour les échelles de sous-maille. Il existe un grand nombre de modèles de combustion. Pour le régime de prémélange, ces modèles peuvent être classés en deux catégories: les modèles de flammelette et les autres modèles. Les modèles de flammelette, tels que l'approche à densité de surface de flamme [188], le modèle de plissement de la flamme [199], le modèle de fermeture par la vitesse turbulente de flamme [59] et les modèles de type G-equation [86,201], supposent que la flamme a une épaisseur infiniment petite et une structure localement semblable à une flamme laminaire dont la zone de réaction n'est pas affectée par la turbulence, une situation courante dans les brûleurs. Les autres modèles, les plus fréquemment rencontrés sont les modèles de type Eddy-break up [61], le modèle LEM (Linear Eddy Model) [122], le modèle de flamme artificiellement épaissie [32] et les modèles de Pdf transportés [5]. Les modèles de combustion non prémélangée peuvent être classés en trois catégories: les modèles à chimie infiniment rapide tels que les modèles à Pdf présumée [16] de la fraction de mélange z , les modèles de flammelettes à chimie non infiniment rapide basés sur les bibliothèques de flammelettes et les Pdf présumées [140] de la fraction de mélange z et du taux de dissipation χ ou sur la densité de surface de flamme [192] et les modèles basés sur la fermeture des termes de micro-mélange turbulent (diffusion de sous-maille des espèces), tels que la fermeture du moment conditionnée (CMC) [13] ou l'équation de transport des pdf de sous-maille [158]. Le modèle LEM (Linear Eddy Model) [81 – 85] est une technique particulière basée sur une approche stochastique 1D pour traiter les termes de sous-maille. La plupart de ces modèles ne sont valables que dans un seul type de combustion (prémélange ou diffusion). Le modèle de Pdf transporté et le modèle LEM peuvent être utilisés dans tous les cas, mais ce sont des techniques très coûteuses. Néanmoins certains modèles, comme le modèle de flamme épaissie [100] ou la G-equation [48], peuvent être étendus à la combustion partiellement prémélangée. Les tableaux 1.1 et 1.2 récapitulent les principales caractéristiques de ces modèles, leur capacité à traiter la combustion prémélangée ou non prémélangée et les hypothèses faites sur la chimie. La liste des modèles présentés n'est pas exhaustive.

Combustion turbulente prémélangée			
	Modèle	Références	Description
(1)	G-equation basée sur la variable d'avancement	Kim et al. [88]	Evolution du front de flame décrite par l'équation de G
	L'approche Level-set	Duchamp de Lageneste et Pitsch [47]	Evolution du front de flamme gouvernée par l'équation de G
	Densité de surface de flamme	Huang et al. [71] Hawkes et Cant [67]	Le taux de réaction filtré modélisé par l'introduction d'une dsf
	Plissement de la flamme	Weller et al.[199]	Taux de réaction filtré modélisé à l'aide du facteur de plissement de la flamme
	fermeture par la vitesse turbulente de flamme	Flohr et Pitsch [59]	La vitesse turbulente de flamme utilisée pour modéliser le taux de réaction filtré
(2)	modèle de type Eddy-breakup	Fureby et Lofstrom [61] Fureby et Moller [62]	Taux de réaction filtré déterminé par le mélange et la cinétique chimique
	Linear-Eddy Model	Chakravarthy et Menson [22]	Les petites échelles de la turbulence et la réaction chimique sont traitées en utilisant un modèle 1D
	TFLES (flamme épaissie)	Angelberger et al. [6] Colin et al. [32]	une loi d'Arrhénius est utilisée pour épaissir artificiellement la flamme
	Pdf transporté	Charlette et al. [23,24] Anand et Pope [5]	Equation de transport de Pdf pour les échelles de sous-maille

TAB. 1.1 – Les modèles de turbulence en combustion prémélangée peuvent être classés en deux catégories: (1) les modèles de flammelles, (2) les modèles qui prennent en compte l'épaisseur de la zone de réaction.

Combustion turbulente non prémélangée		
Modèle	Références	Chimie
Pdf présumée $\tilde{P}(Z)$	Borghgi [16]	Infiniment rapide 1 étape ou multi-étapes
Flammelettes (Diffusion+Réaction) Librairies de flammelettes et Pdf présumée $\tilde{P}(Z,\chi)$	Peters [140] Ferreira [56]	Non infiniment rapide 1 étape multi-étapes
Densité de surface de flamme Σ	Van Kalmthout et Veynante [192]	1 étape
Pdf(micro mélange) + (réaction) CMC Pdf transporté LEM	Bilger [13] Swaminathan et Bilger [183] Pope [158] Kerstein [81]	Non infiniment rapide multi-étapes

TAB. 1.2 – Les modèles de turbulence en combustion non prémélangée peuvent être classés en trois catégories: (1) les modèles à chimie infiniment rapide, (2) les modèles de flammelette à chimie non infiniment rapide, (3) les modèles de micro mélange.

Le deuxième axe de recherche autour duquel ce travail de thèse s'articule est l'identification de la réponse de la chambre de combustion aux perturbations acoustiques. Les instabilités de combustion se manifestent par de fortes oscillations de la pression et peuvent conduire à de sérieuses dégradations des performances. Ces oscillations de pression sont souvent couplées avec la combustion (oscillations du taux de dégagement de chaleur) et avec l'écoulement (oscillations du débit). Ces instabilités sont souvent indésirables car elles ont plusieurs effets néfastes:

- Les fluctuations du taux de dégagement de chaleur augmentent les transferts de chaleur aux parois, pouvant conduire à leur dégradation.
- La déstabilisation de la flamme provoque localement des extinctions.
- les variations du débit peuvent provoquer le "flash-back", la flamme remonte dans les injecteurs conduisant un endommagement important.
- Les fluctuations de pression entraînent des vibrations mécaniques de la structure du système.
- Ces instabilités se manifestent par une pollution sonore indésirable.

Les mécanismes caractérisant les instabilités de combustion sont complexes, car ils résultent de l'interaction entre plusieurs phénomènes physiques, la propagation instationnaire de la flamme générant des fluctuations de vitesse, la propagation d'ondes acoustiques et les instabilités hydrodynamiques [119]. Bien que ces phénomènes soient très complexes, le processus essentiel responsable de la création de l'instabilité est assez simple. La combustion instationnaire génère du bruit [203]. Si le bruit est généré dans un milieu confiné, il peut être réfléchi aux bords, permettant aux ondes réfléchies d'interagir avec la combustion. La combustion est sensible aux variations des paramètres de l'écoulement et l'effet retour peut conduire à une instabilité de combustion. Les stratégies couramment adoptées pour les supprimer sont basées sur des mécanismes de contrôle actif [119]. Pour éliminer passivement ces instabilités durant les phases de conception des moteurs, il est essentiel de pouvoir les prédire. Il est courant de tester sur des bancs d'essais des brûleurs dans des configurations simplifiées pour vérifier leur stabilité, mais c'est une approche ambiguë, car l'existence de l'instabilité est très sensible aux variations de la géométrie et aux conditions opératoires. Des méthodes (codes acoustiques) pouvant fournir une analyse de stabilité avant de réaliser des tests sont donc nécessaires. Ces méthodes reposent sur la description de la combustion à l'aide de formulations linéaires simplifiées. Cette description nécessite la connaissance de la fonction de transfert de la flamme. Une technique pour comprendre la source de ces instabilités et pour les contrôler est la simulation aux grandes échelles (LES) [88,145,148,153,172,161]. Les études menées avec la LES se sont avérées encourageantes mais son

potentiel a encore besoin d'être démontré:

- La LES est employée pour prédire les structures des grandes échelles, qui sont précisément rencontrées lors des instabilités de combustion.
- La LES progresse rapidement et actuellement elle peut être utilisée pour résoudre les écoulements réactifs dans des géométries complexes de turbines à gaz.
- Néanmoins, la LES requiert encore des validations, son coût est encore élevé et de nombreux modèles ne sont pas intégrés (écoulements diphasiques, cinétique complexe, effets radiatifs...).

1.3 Plan de thèse

Ce mémoire de thèse est structuré comme suit: l'introduction représente le Chapitre 1, ensuite le manuscrit comporte quatre parties:

Partie I

- Le **Chapitre 2** introduit les trois types de combustion rencontrés dans les écoulements réactifs turbulents des turbines à gaz: prémélange, diffusion et prémélange partiel. Quelques modèles de combustion sont brièvement présentés, tels que les modèles de type G-equation et le modèle de flamme épaissie pour la combustion prémélangée, et les méthodes Pdf pour les flammes de diffusion turbulentes. Le cas particulier de la flamme détachée dans le cas de la combustion partiellement prémélangée est présenté.
- Le **Chapitre 3** décrit comment sont traités la cinétique chimique et la thermodynamique dans le code AVBP. En outre, il propose un état de l'art sur la réduction des schémas cinétiques. Pour mieux reproduire les caractéristiques de la flamme, des schémas cinétiques multi-réactions ont été développés et implantés dans le code pour les simulations numériques présentées dans ce mémoire. La description et la validation de ces schémas à l'aide de cas tests simples sont données dans ce chapitre.
- Le **Chapitre 4** donne une description du code LES (AVBP): les équations pour la LES, la turbulence et la combustion turbulente sont présentées. Ce chapitre présente le modèle de flamme épaissie dynamiquement, qui permet de reproduire la réaction et ses interactions stationnaires avec la turbulence. Il présente ensuite le modèle de combustion développé pour cette étude. Il se base sur le modèle de flamme épaissie dynamiquement et prend en compte toutes les réactions.

Partie II

Cette partie est formée d'un seul chapitre. Il décrit les méthodes de mesure des fonctions de transfert de flammes. Cette partie est constituée d'un article destiné à la publication dans *Combustion & Flame* et est rédigé en anglais. Deux méthodes pour mesurer la fonction de transfert (FTF et ITM) sont décrites et comparées. Suite à cette étude comparative, les méthodes FTF ont été étendues en s'appuyant sur le calcul numérique d'un brûleur de type bec-bunsen et sur les mesures expérimentales de Le Helley [97]. La nouvelle formulation permet d'obtenir des résultats consistants quels que soient la position du point de référence et les conditions acoustiques aux limites.

Partie III

Cette partie présente un premier cas de validation de la LES réactive dans une configuration académique non prémélangée. Les résultats proviennent de l'étude expérimentale d'un brûleur élaboré par B. Varoqué et F. Lacas au laboratoire EM2C (Chatenay Malabry).

- Le **Chapitre 6** décrit l'installation expérimentale, les différents diagnostics réalisés (PLIF sur OH/acétone, PIV, etc..) et les outils et stratégies choisies pour les calculs numériques.
- Le **Chapitre 7** présente les résultats et comparaisons avec l'expérience dans le cas d'un régime de flamme détachée. Les comparaisons sont réalisées en termes de position moyenne de la flamme (mesurée par l'émission du radical CH ou OH), la longueur de la flamme (mesurée par une analyse de gaz), le champ moyen de vitesse (mesuré par PIV dans les gaz frais).
- Le **Chapitre 8** présente les résultats et comparaisons avec l'expérience dans le cas d'un régime pulsé acoustiquement. L'application de l'étude décrite dans la partie A2 est réalisée.

Partie IV

Cette dernière partie présente une application des modèles de combustion à une configuration industrielle avec une géométrie complexe. Les calculs réalisés permettent de tester la faisabilité d'un calcul LES dans une géométrie comprenant des éléments tels que les pâles des swirlers, l'injecteur, les trous de dilution, des films de refroidissement et une tuyère supersonique en sortie.

- Le **Chapitre 9** décrit brièvement les caractéristiques des écoulements swirlés, couramment présents dans les chambres de combustion: leur rôle, leur caractérisation, les phénomènes instationnaires qu'ils peuvent générer.
- Le **Chapitre 10** détaille l'installation expérimentale, les différents diagnostics réalisés à

froid et les calculs réalisés.

- Le **Chapitre 11** présente les résultats du calcul non réactif et la comparaison avec les mesures expérimentales. Les champs moyens de vitesse et les structures instationnaires sont analysées en détail.
- Le **Chapitre 12** présente les résultats des calculs réactifs. Deux calculs ont été réalisés avec deux schémas cinétiques différents. Tout d’abord, le bon comportement du modèle d’épaississement est vérifié. Ensuite, les résultats obtenus avec chacun des schémas cinétiques sont confrontés, en terme de position et de longueur de flamme, de température et de composition des gaz brûlés. Enfin, une description des modes propres acoustiques de la configuration et des structures instationnaires est donnée. Néanmoins, l’absence de résultats expérimentaux limite les analyses et les conclusions.

Première partie

Étude bibliographique et méthodologie:
la combustion turbulente partiellement
prémélangée

Chapitre 2

La combustion turbulente

La description de la combustion turbulente commence avec la théorie des flammes laminaires, ensuite l'influence de la turbulence et les différents régimes rencontrés sont brièvement décrits. Les modèles de combustion les plus fréquents sont présentés dans ce chapitre. Ces modèles ne sont pas décrits en détail et il est conseillé de se référer aux citations pour des analyses détaillées. Enfin, une description du code de calcul AVBP est donnée.

2.1 La combustion turbulente prémélangée

2.1.1 Flamme de prémélange laminaire

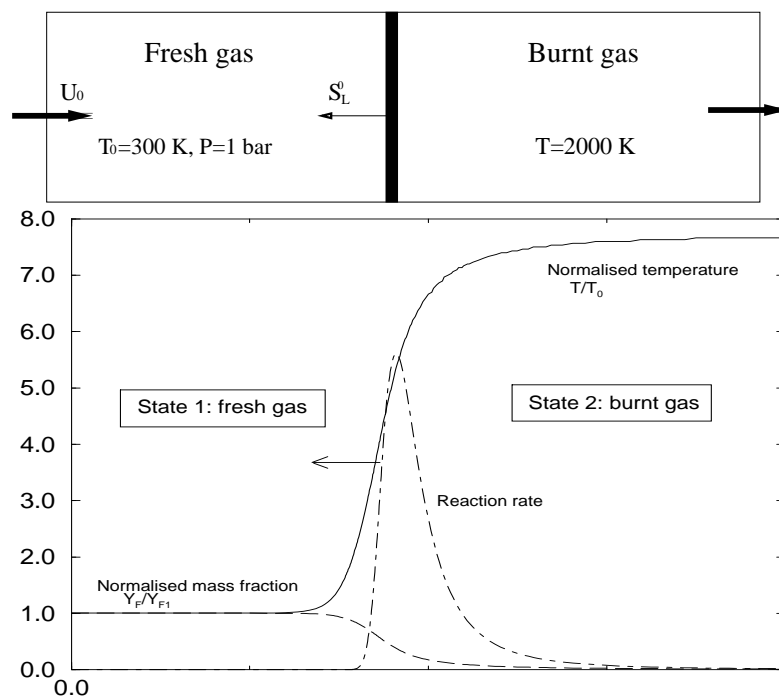


FIG. 2.1 – Structure d'une flamme laminaire de prémélange.

La structure de la flamme de prémélange laminaire est représentée sur la figure 2.1. Les gaz frais (fuel et oxydant) et les gaz brûlés (produits de la combustion) sont séparés par une mince zone de réaction, dont l'épaisseur est de l'ordre de 0.1 à 1 mm. Dans cette zone de réaction, siége des réactions chimiques, les espèces intermédiaires et les produits de combustion sont formés. Le front de flamme est caractérisé par un fort gradient de température (le rapport des températures entre les gaz brûlés et les gaz frais est de l'ordre de 5 à 7), alors que le saut de pression est très faible (environ 1 Pascal). La présence de ce fort gradient de température et donc de transfert de flux thermique conduit au préchauffage des gaz frais puis à la combustion. Le déséquilibre entre la diffusion thermique et la réaction chimique conduit à la propagation du front de flamme des gaz brûlés vers les gaz frais à la vitesse laminaire de flamme S_L . Cette vitesse dépend de nombreux

paramètres: composition, température et pression dans les gaz frais. Pour les hydrocarbures simples, S_L varie entre 0.1 et 1 m/s. Une conséquence immédiate de l'existence d'une échelle de vitesse dans une zone contrôlée par la diffusion (et la réaction chimique) est l'existence d'une échelle de longueur, en particulier l'épaisseur de flamme. Une première définition permet de relier la diffusivité thermique dans les gaz frais D_{th}^1 à la vitesse de flamme S_L :

$$\delta = \frac{D_{th}^1}{S_L} \quad (2.1)$$

Cette relation équivaut à dire que le nombre de Reynolds de flamme vaut 1, soit:

$$Re_f = \delta S_L / D_{th}^1 = 1 \quad (2.2)$$

L'épaisseur de flamme δ est facile à calculer, mais elle n'est pas suffisamment précise. Une autre définition, appelée "épaisseur thermique" est plus souvent utilisée. Celle-ci se base sur le profil de température au passage du front. Elle caractérise la zone sur laquelle la température croît jusqu'à atteindre la température maximale $T_2 = T_{ad}$, appelée température adiabatique de flamme, lorsque l'équilibre chimique est atteint :

$$\delta_L = \frac{T_2 - T_1}{\max(|\frac{\partial T}{\partial x}|)} \quad (2.3)$$

Les échelles de longueur des flammes laminaires sont décrites en détail dans [142,153].

2.1.2 Influence de la turbulence

Si on laisse se propager une flamme de prémélange laminaire 1D dans un écoulement turbulent, alors on observe une flamme plissée d'épaisseur moyenne δ_T se propager à la vitesse S_T (fig 2.2). Les résultats expérimentaux montrent que dans un écoulement turbulent, S_T est supérieure à la vitesse de flamme laminaire S_L , de même l'épaisseur δ_T est supérieure à l'épaisseur laminaire δ_L . Des relations empiriques ont été proposées par Abdel-Gayed [2,1], par exemple.

En pratique, on ne s'intéresse qu'au comportement de la flamme aux grandes échelles, i.e., une flamme où tous les petits plissements ont été "filtrés". Dans un calcul numérique destiné à prédire ce comportement aux grandes échelles, on peut espérer ne pas devoir résoudre les plissements dûs aux tourbillons des petites échelles, ce qui serait très coûteux en terme de résolution. Cependant, ces petits plissements ont un impact non négligeable sur le comportement de la flamme aux grandes échelles qui ne peut être ignoré dans la simulation, à savoir, l'augmentation de la vitesse de propagation due à ces tourbillons de sous-maille et la déformation éventuelle du front aux grandes échelles qui en résulte. Un modèle ad-hoc fréquemment utilisé est de considérer que

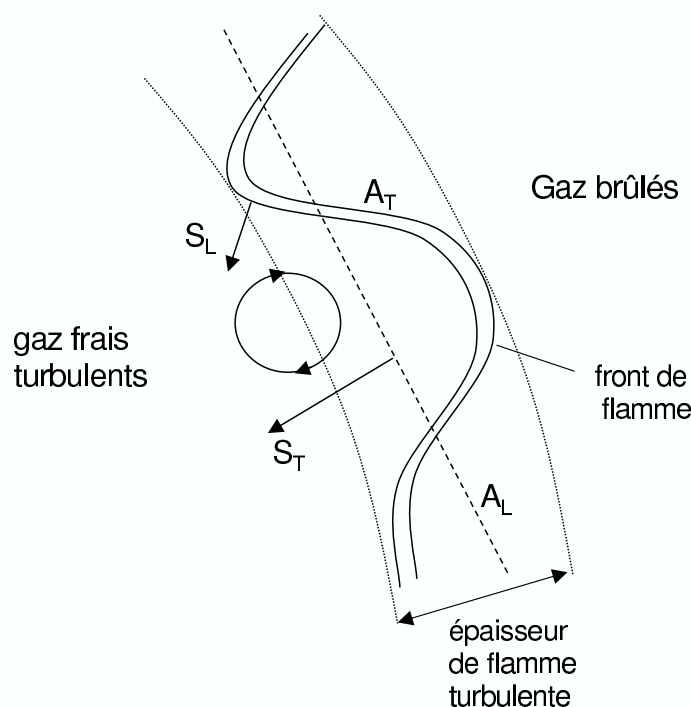


FIG. 2.2 – Plissement de la flamme de prémélange monodimensionnelle dû à la turbulence. L’augmentation de la vitesse globale de flamme résulte de l’augmentation de la surface de réaction.

l’augmentation de vitesse de combustion par la turbulence est proportionnelle aux plissements de la flamme. Ce modèle est basé sur l’idée que tant que les plus petites échelles de la turbulence demeurent plus grandes que l’épaisseur de la flamme, cette dernière n’est pas affectée par la turbulence et sa structure transverse est essentiellement identique au profil observé dans le cas laminaire. L’augmentation de vitesse ne résulte alors que de la seule augmentation de la surface de réaction à cause des plissements qui sont à leur tour proportionnels à l’intensité de la turbulence. Il en résulte une relation entre la vitesse turbulente de flamme S_T et le plissement de la surface de flamme, proposée par Damköhler [39]:

$$\frac{S_T}{S_L} = \frac{A_T}{A_L} \quad (2.4)$$

où A_L et A_T sont les surfaces de flamme correspondant aux flammes laminaire et turbulente respectivement. Le rapport A_T/A_L est le facteur de plissement de la flamme, noté Ξ .

Si la turbulence modifie le front de flamme, la flamme elle-même modifie l’écoulement turbulent. En effet, la variation de température au passage de la flamme entraîne une augmentation de la viscosité cinématique ν et donc une diminution du nombre de Reynolds, pouvant avoir comme conséquence une relaminarisation de l’écoulement dans les gaz brûlés [103]. Paradoxalement, la dilatation au passage de la flamme provoque une brusque accélération de l’écoulement du fait de

la différence de vitesses de chaque côté du front. La vorticit   est affect  e par l'existence de ce gradient de vitesse, on peut alors observer la cr  ation de tourbillons du c  t   des gaz br  l  s [129].

2.1.3 R  gimes de combustion turbulente pr  m  lang  e

Des diagrammes d  finissant les r  gimes de combustion turbulente en termes d'  chelles de vitesses et de longueurs ont   t   propos  s par Williams [200], Borghi [15], Peters [141], Abdel-Gayed et Bradley [1] et Poinso et al. [155]. Ils ont pour objectif d'analyser et de comparer les   chelles caract  ristiques de temps et de longueur de la turbulence et de la chimie.

La premi  re   tape est de d  finir un nombre de Reynolds comparant le transport turbulent aux forces visqueuses:

$$Re_t = \frac{u'_t l_t}{\nu} \quad (2.5)$$

o   u'_t repr  sente la fluctuation de vitesse, l_t est l'  chelle de longueur int  grale de la turbulence et ν est la viscosit   cin  matique. En utilisant la relation (2.2) du nombre de Reynolds de flamme et en supposant les propri  t  s diffusives et visqueuses identiques, afin d'avoir un nombre de Prandtl   gal    l'unit   $Pr = \nu/D_{th}$, nous pouvons d  finir le nombre de Reynolds turbulent comme suit:

$$Re_t = \frac{u'_t l_t}{S_L \delta} \quad (2.6)$$

Le nombre de Damk  hler compare les   chelles de temps turbulent ($\tau_t = l_t/u'_t$) et chimique ($\tau_c = \delta/S_L$):

$$Da = \frac{\tau_t}{\tau_c} = \frac{l_t S_L}{\delta u'_t} \quad (2.7)$$

τ_c peut-  tre interpr  t   comme le temps n  cessaire    la flamme pour se propager sur une distance   gale    son   paisseur.

Le nombre de Karlovitz compare les   chelles de temps associ  es    la r  action chimique τ_c et aux plus petites   chelles de la turbulence (les   chelles de Kolmogorov) $\tau_k = \eta_k/u'_k$, o   η_k et u'_k sont respectivement la taille et la vitesse caract  ristiques des plus petits tourbillons de l'  coulement:

$$Ka = \frac{\tau_c}{\tau_k} = \left(\frac{\tau_k}{\tau_c} \right)^{-1} = \frac{\delta u'_k}{\eta_k S_L} \quad (2.8)$$

La taille η_k et la vitesse u'_k des structures de Kolmogorov sont donn  es par:

$$\eta_k = \left(\frac{\nu^3}{\varepsilon} \right)^{1/4} ; \quad u'_k = (\nu\varepsilon)^{1/4} \quad (2.9)$$

L'  quilibre entre production et dissipation permet d'  crire:

$$\varepsilon = \frac{u'_k{}^3}{\eta_k} \quad (2.10)$$

On peut aussi définir des nombres de Reynolds Re_r , pour chaque classe de structure r ($\eta_k < r < l_t$) en utilisant les relations 2.9 et 2.10:

$$r = Re_r^{3/4} \eta_k \quad \text{et} \quad u'_r = Re_r^{1/4} u'_k \quad (2.11)$$

Ces dernières égalités permettent de relier les échelles intégrales aux échelles de Kolmogorov:

$$l_t = Re_t^{3/4} \eta_k \quad \text{et} \quad u'_t = Re_t^{1/4} u'_k \quad (2.12)$$

En utilisant les Eqs. 2.2 et 2.9, le nombre de Karlovitz Ka peut aussi s'écrire:

$$Ka = \left(\frac{\delta}{\eta_k} \right)^2 = \left(\frac{u'_k}{S_L} \right)^2 \quad (2.13)$$

Le nombre de Karlovitz est donc égal à l'inverse du nombre de Damköhler défini avec les échelles de Kolmogorov à la place des échelles intégrales de la turbulence. Le nombre de Damköhler défini dans l'Eq. (2.7), n'a pas de réelle signification puisque l'interaction entre la chimie et la turbulence n'a lieu qu'aux plus petites échelles. Par contre pour une flamme laminaire, la condition $Da = 1$ correspond à la plus grande valeur de la longueur de mélange. En effet en utilisant l'Eq. (2.1), le temps chimique peut être relié à la diffusivité et être alors interprété comme le temps nécessaire pour que la chaleur ou les espèces diffusent sur la distance δ :

$$\tau_c = \frac{\delta^2}{D_{th}} \quad (2.14)$$

En écrivant $\tau_c = \tau_t$ dans l'Eq. (2.9), on obtient une échelle de longueur:

$$l_m = (\varepsilon \tau_c^3)^{1/2} \quad (2.15)$$

Cette échelle peut être interprétée comme une longueur de mélange. Elle correspond à l'échelle spatiale dans la zone inertielle dont le temps de retournement est égal au temps de diffusion de la chaleur sur l'épaisseur de la flamme δ .

Ces définitions peuvent être utilisées pour relier les termes u'_t/S_L et l_t/δ en fonction de deux nombres sans dimension Re et Ka :

$$u'_t/S_L = Re (l_t/\delta)^{-1} = Ka^{2/3} (l_t/\delta)^{1/3} \quad (2.16)$$

Nous pouvons maintenant commenter le diagramme de la Fig. 2.3 sur laquelle u'_t/S_L est tracé en fonction de l_t/δ en échelles logarithmiques.

Parmi les quatre régimes, les flammes plissées appartiennent au régime dit "de flammelette", caractérisé par la turbulence ($Re > 1$) et une chimie rapide ($Ka < 1$). Le régime de flammelette

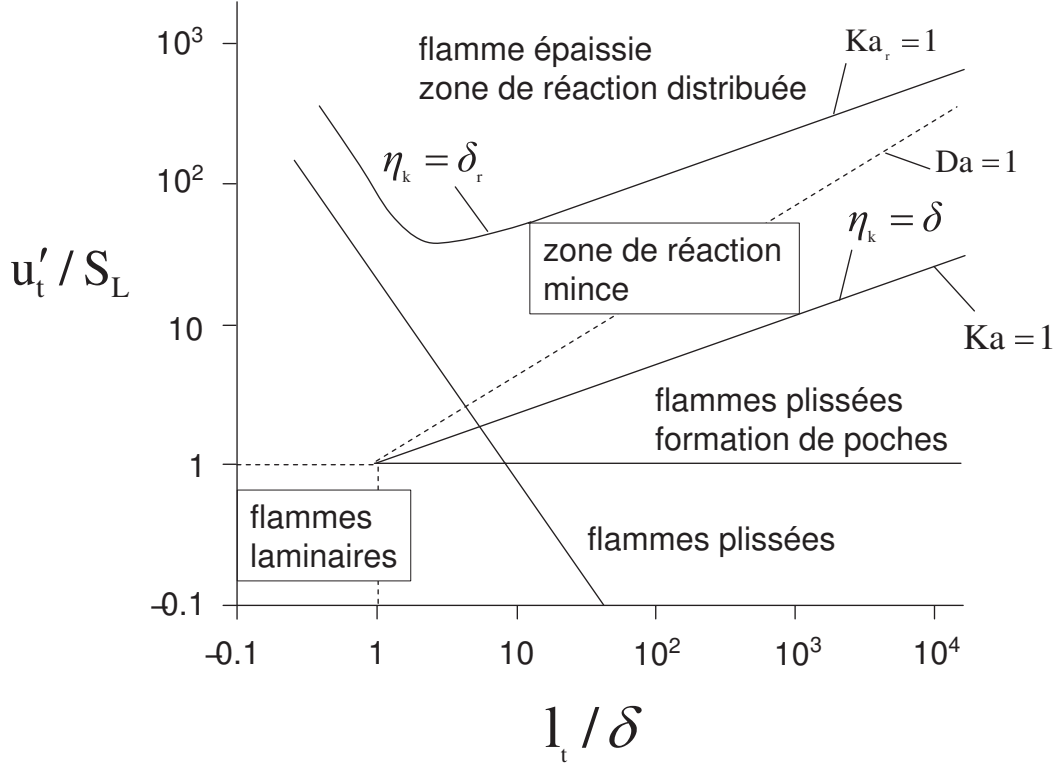


FIG. 2.3 – Diagramme des régimes de combustion turbulente prémélangée [153].

est divisé entre le régime de flammes minces plissées et le régime de flammes minces plissées avec formation de poches. Dans le premier cas $u'_t < S_L$, l'intensité de la turbulence n'est pas suffisante pour que les fronts de flammes interagissent entre eux. Dans le deuxième cas, une interaction entre la propagation turbulente et laminaire de la flamme est possible. Le régime de flammelette avec une zone de réaction mince est caractérisé par une zone de réaction ou de dégagement de chaleur d'épaisseur δ_r très inférieure aux épaisseurs diffusive (δ) ou thermique (δ_L) de flamme. Puisque $Ka > 1$, on a $u'_k \geq S_L$. Dans cette région, les plus petits tourbillons ($Re > 1$) sont capables d'affecter la zone de préchauffage et d'augmenter le mélange puisque $\eta_k < \delta$ mais tant que $\eta_k > \delta_r$, la zone de réaction qui reste mince est plissée, mais localement semblable à une flamme laminaire.

Pour le régime de zones de réaction distribuées, nous devons introduire le nombre de Karlovitz basé sur l'épaisseur de la zone réactive δ_r :

$$Ka_r = \left(\frac{\delta_r}{\eta_k} \right)^2 = \delta^2 Ka \quad (2.17)$$

Lorsque $Ka_r > 1$, les échelles de Kolmogorov deviennent plus petites que l'épaisseur de réaction ($\eta_k < \delta_r$), dans cette situation, la flamme est fortement affectée par les tourbillons et aucune structure de flamme laminaire ne peut être identifiée.

2.2 Modélisation de la combustion turbulente prémélangée

Tous les modèles de combustion ne sont pas présentés dans cette section, et le lecteur pourra consulter les références données dans la section 1.2 pour des descriptions détaillées. Alors que l'épaisseur d'une flamme de prémélange est typiquement de l'ordre de 0.1 mm pour un hydrocarbure, il est nécessaire en LES de pouvoir propager une flamme sans avoir à résoudre exactement sa structure. Il existe deux moyens pour résoudre ce problème:

- La flamme est traitée comme une interface d'épaisseur nulle, comme dans la G-equation.
- Le front est épaissi pour résoudre la flamme sur le maillage, c'est le cas du modèle de flamme épaissie.

2.2.1 Modèles de type G-equation

Le principe de base de ce modèle est de décrire la flamme d'un point de vue géométrique. Le front de flamme est représenté par l'iso-surface G_0 dans un champ scalaire G dont l'évolution est formulée à l'aide de la "G-equation". Le champ de G en dehors de la flamme peut être défini de différentes façon, c'est pourquoi il existe plusieurs approches. Menon et al. [21,121] considèrent G comme une variable d'avancement, i.e., $G = 0$ dans les gaz frais et $G = 1$ dans les gaz brûlés. Ce modèle est simple et facile à implementer mais le gradient de G présente des discontinuités difficiles à traiter numériquement. Ce problème peut être résolu par l'utilisation d'un schéma numérique adapté ou par l'introduction d'une viscosité artificielle, qui provoquent en contrepartie l'élargissement de la flamme. Une autre approche, appelé "level-set" est proposée par Peters [145]. G est alors définie comme une distance par rapport au front de flamme en posant $|\nabla G(x; t)| = 1$, dont la position est donnée par $G = G_0 = 0$. Cette approche, combiné avec une librairie de flammelette et une méthode de Pdf présumée, permet un traitement plus correct de la dynamique de la flamme de prémélange turbulente [48,71].

G-equation basé sur la variable d'avancement

La propagation de la surface de flamme est décrite par [86] [200]:

$$\rho \frac{\partial G}{\partial t} + \underbrace{\rho \mathbf{u} \cdot \nabla G}_{Convection} = \underbrace{\rho S_d |\nabla G|}_{Propagation} \quad (2.18)$$

Dans cette équation, l'équilibre entre la diffusion et la réaction chimique dans la flamme est assuré par la vitesse locale de déplacement du front de flamme par rapport à l'écoulement S_d .

Cette équation n'étant définie que sur le front de flamme, elle n'est valide que lorsque $G = G_0$. En outre, elle n'est valable que dans le régime de flammelette, i.e, dans le cas où les interactions entre la flamme et la turbulence sont principalement d'ordre cinématique. En prenant en compte les effets de l'étirement de la flamme, une formulation pour S_d a été dérivée par Pelce et Clavin [139] ainsi que Matalon et Matkowsky [117]:

$$S_d = S_L^0 - S_L^0 \mathcal{L}_M^d \kappa - \mathcal{L}_M^d S \quad (2.19)$$

où S_L^0 est la vitesse laminaire d'une flamme plane non étirée, κ est la courbure du front de flamme ($\kappa = \nabla \mathbf{n}$) avec \mathbf{n} le vecteur unité normal au front de flamme et dirigé vers les gaz brûlés [145], \mathcal{L}_M^d est la longueur de Markstein [153], elle est du même ordre de grandeur et proportionnelle à l'épaisseur de flamme laminaire δ . Le taux d'étirement imposé à la flamme par les gradients de vitesse est défini par S :

$$S = -\mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} \quad (2.20)$$

Néanmoins dans le régime de flammelette où $S_L^0 > u'_k$, le terme de propagation est dominant par rapport à la courbure et à l'étirement du front de flamme. Dans ce cas, S_d peut être assimilé à S_L^0 . Peters [144] a étendu la G-equation au régime de zone de réaction mince en ajoutant un terme de courbure. Dans cette situation, les échelles de Kolmogorov pénètrent dans la zone de préchauffage de la flamme et provoquent des perturbations par diffusion :

$$\rho \frac{\partial G}{\partial t} + \rho \mathbf{u} \cdot \nabla G = \rho s_d |\nabla G| - \rho D \kappa |\nabla G| \quad (2.21)$$

où D est la diffusivité moléculaire. Dans le régime de zone de réaction mince, le terme de propagation S_d est petit par rapport au terme de courbure. De plus, des calculs DNS [146] ont montrés que S_d était du même ordre de grandeur que S_L^0 .

Après élimination des termes négligeables (une analyse dimensionnelle est donnée dans Peters [145]), une équation est proposée pour les deux régimes:

$$\rho \frac{\partial G}{\partial t} + \rho \mathbf{u} \cdot \nabla G = \rho s_L^0 |\nabla G| - \rho D \kappa |\nabla G| \quad (2.22)$$

Selon l'approche classique de filtrage LES (moyennes de Favre), G et \mathbf{u} sont décomposés en leur valeur filtrée ($\tilde{G} = \overline{\rho G} / \bar{\rho}$ et $\tilde{\mathbf{u}} = \overline{\rho \mathbf{u}} / \bar{\rho}$) et en fluctuation de sous-maille (G', \mathbf{u}'). Le filtrage de l'Eq. 2.22 conduit à:

$$\underbrace{\bar{\rho} \frac{\partial \tilde{G}}{\partial t}}_I + \underbrace{\bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}} \cdot \nabla \tilde{G}}_{II} + \underbrace{\nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}}' \tilde{G}')}_{III} = \underbrace{(\rho S_L^0) \overline{|\nabla G|}}_{IV} - \underbrace{(\rho D) \overline{\kappa |\nabla G|}}_V \quad (2.23)$$

Le terme V est proportionnel à la diffusivité moléculaire. Il est supposé être petit pour les valeurs du nombre de Reynolds considérées et est donc négligé. Le terme de transport turbulent III est

modélisé comme un terme de courbure [145] par $\bar{\rho}D_t\tilde{\kappa}|\nabla\tilde{G}|$, où D_t est la diffusivité turbulente et $\tilde{\kappa}$ est la courbure filtrée du front de flamme. Enfin le terme IV peut être modélisé en introduisant une vitesse de flamme turbulente S_T :

$$\bar{\rho}\frac{\partial\tilde{G}}{\partial t} + \bar{\rho}\tilde{\mathbf{u}} \cdot \nabla\tilde{G} = \underbrace{\bar{\rho}S_T|\nabla\tilde{G}|}_{\text{Propagation}} - \underbrace{\bar{\rho}D_t\tilde{\kappa}|\nabla\tilde{G}|}_{\text{Courbure}} \quad (2.24)$$

La fermeture de l'équation est possible en modélisant la vitesse turbulente de flamme. Les modèles sont souvent basés sur une formulation empirique de la forme:

$$\frac{S_T}{S_L} = 1 + C \left(\frac{u'}{S_L} \right)^n \quad (2.25)$$

où u' désigne l'intensité turbulente de sous-maille, C est une constante et n est une valeur qui dépend du régime de combustion. Néanmoins, cette estimation n'est souvent pas correcte. En effet, il a été observé sur des expériences de flammes prémélangées et détachées [191] que la flamme ne se propage pas plus vite lorsque l'intensité turbulente augmente. Peters [144] propose un autre modèle pour S_T basé sur des calculs DNS dans lequel non seulement les échelles de vitesses turbulentes (u'_t/S_L) mais aussi les échelles de longueur des tourbillons (l_t/δ) sont pris en compte, ce qui rejoint le principe du modèle ITNFS [120].

G-equation basé sur la distance à la flamme

La démarche est la même que précédemment, sauf que G est définie comme une fonction distance. L'écoulement, en dehors de la flamme dont la position est déterminée par $\tilde{G}(\mathbf{x},t) = G_0$, convecte des scalaires avec des vitesses différentes de la vitesse du front de flamme, ce qui modifie le gradient $|\nabla\tilde{G}|$ et par conséquent la vitesse de propagation de ces scalaires est à son tour modifiée. Ce problème peut être contourné en imposant à chaque pas de temps la condition:

$$|\nabla\tilde{G}| = 1 \quad (2.26)$$

Pour satisfaire cette condition une procédure numérique, appelée réinitialisation, est appliquée. Une méthode proposée par Sussman et al. [182] permet de résoudre à chaque pas de temps l'équation:

$$\frac{\partial g}{\partial t} = \text{signe}(\tilde{G}(\mathbf{x},t) - G_0)(1 - |\nabla g|) \quad (2.27)$$

En partant de la condition initiale $g(\mathbf{x},t = t_0) = \tilde{G}(\mathbf{x},t)$, le champ de g est calculé jusqu'à atteindre la solution stationnaire $g_\infty(\mathbf{x})$. $\tilde{G}(\mathbf{x},t)$ est alors remplacé par la valeur $g_\infty(\mathbf{x})$ à ce pas de temps, tandis que la surface $\tilde{G}(\mathbf{x},t) = G_0$ n'est pas corrigée.

2.2.2 Le modèle de flamme épaissie en LES TF-LES

La méthode de flamme artificiellement épaissie a été proposée initialement par Butler et O'Rourke [19] pour propager une flamme laminaire de prémélange sur un maillage grossier. Elle a été étendue par la suite au cas de la combustion turbulente [6,7,32]. Dans certaines DNS, il peut-être utile de propager le front de flamme sans avoir à résoudre exactement sa structure.

Principe

Le modèle de flamme épaissie permet de résoudre la zone réactive en utilisant une loi d'Arrhénius:

$$\dot{\omega}_F = AY_F^{n_F}Y_{O_2}^{n_{O_2}} \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right) \quad (2.28)$$

où $\dot{\omega}_F$ est le taux de réaction du fuel, Y_F et Y_{O_2} sont respectivement la fraction massique de fuel et de l'oxygène, A est la constante pre-exponentielle, E_a est l'énergie d'activation, n_F et n_{O_2} des constantes. Des analyses dimensionnelles [94,200] montrent que la vitesse laminaire de flamme S_L^0 et l'épaisseur laminaire de flamme δ_L^0 sont estimés par les termes diffusifs et les termes sources de la façon suivante:

$$S_L^0 \propto \sqrt{D_{th}A} \quad (2.29)$$

$$\delta_L^0 = \frac{D_{th}}{S_L} \propto \sqrt{\frac{D_{th}}{A}} \quad (2.30)$$

En multipliant la diffusivité thermique D_{th} par un facteur F et en divisant le facteur pre-exponentiel du même facteur F , l'épaisseur thermique δ_L^0 est multipliée par F alors que la vitesse laminaire de flamme S_L^0 reste inchangée. Cette approche est très attractive pour les raisons suivantes:

- la réaction chimique est décrite comme en Simulation Numérique Directe avec un maillage adapté au calcul LES, sans modèle de sous-maille,
- grâce à l'utilisation d'une loi d'Arrhénius, beaucoup de phénomènes physiques sont pris en compte sans avoir recours à un modèle supplémentaire: allumage, extinction, stabilisation de la flamme, interactions de la flamme avec les parois...,
- cette approche est ajustable à une cinétique chimique complexe.

Néanmoins, l'épaississement de la flamme a pour conséquence de modifier les interactions entre la turbulence et la chimie. En effet [154], lorsque le rapport entre l'échelle de longueur de la turbulence et l'épaisseur de flamme diminue, la flamme devient moins sensible aux petites structures de l'écoulement (Fig.2.3). De plus les échelles plus petites que $F\delta_L^0$ n'interagissent plus avec la flamme. L'épaississement de la flamme réduit donc la capacité des tourbillons à plisser le front de flamme. La diminution de surface de flamme conduit à une réduction du taux de consommation

globale. Pour corriger cet effet, une fonction d'efficacité a été développée par Colin et al. [32] qui est décrite dans la section 2.2.2.

Le modèle de sous-maille: la fonction d'efficacité

F est un facteur d'épaississement arbitraire, tandis que E est une fonction qui prend en compte le plissement de sous-maille, dérivée à partir de calculs DNS [32] d'interactions flamme / tourbillon. Il existe plusieurs formulations [7,23,24,32] pour la fonction d'efficacité. De façon générale, E est défini comme le rapport entre le plissement de la flamme non épaissie et celui de la flamme épaissie:

$$E = \frac{\Xi(\delta_l^0)}{\Xi(\delta_l^1)} = \frac{1 + \alpha \Gamma \left(\frac{\Delta_e}{\delta_l^0}, \frac{u'_{\Delta_e}}{s_l^0} \right) \frac{u'_{\Delta_e}}{s_l^0}}{1 + \alpha \Gamma \left(\frac{\Delta_e}{\delta_l^1}, \frac{u'_{\Delta_e}}{s_l^0} \right) \frac{u'_{\Delta_e}}{s_l^0}} \quad (2.31)$$

S_L^0 et δ_L^0 sont respectivement la vitesse laminaire et l'épaisseur laminaire de la flamme de prémélange stœchiométrique et non épaissie, et δ_L^1 est l'épaisseur de la flamme épaissie, de sorte que $\delta_L^1 = F\delta_L^0$.

La longueur Δ_e est l'échelle du filtre et c'est aussi l'échelle caractéristique des plus grands tourbillons susceptibles d'interagir avec la flamme épaissie, c'est à dire δ_L^1 . En pratique Δ_e est de l'ordre de $10\Delta_x$ où Δ_x est la taille caractéristique des cellules du maillage (définie comme la racine cubique du volume de la cellule $\Delta_x = V_{cell}^{1/3}$), est une bonne estimation. u'_{Δ_e} est l'amplitude des fluctuations de vitesse à l'échelle Δ_e .

α est une constante du modèle et d'après Colin [32], $\alpha \propto Re^{-1/2}$.

La fonction Γ modélise l'intégration des contributions au plissement de tous les tourbillons affectés par l'épaississement, c'est à dire entre les échelles de Kolmogorov η_k et l'échelle du filtre Δ_e [120].

La fonction Γ s'écrit:

$$\Gamma \left(\frac{\Delta_e}{\delta_l^1}, \frac{u'_{\Delta_e}}{s_l^0} \right) = 0.75 \exp \left[-\frac{1.2}{(u'_{\Delta_e}/s_l^0)^{0.3}} \right] \left(\frac{\Delta_e}{\delta_l^1} \right)^{2/3} \quad (2.32)$$

2.3 La combustion turbulente non prémélangée et partiellement prémélangée

Les écoulements réactifs turbulents sont le siège d'interactions complexes entre le mélange microscopique et macroscopique et les réactions chimiques. La description de ces interactions dans une flamme de diffusion peut être simplifiée par l'utilisation de scalaires passifs, tel que la fraction de mélange.

2.3.1 Configuration d'une flamme de diffusion

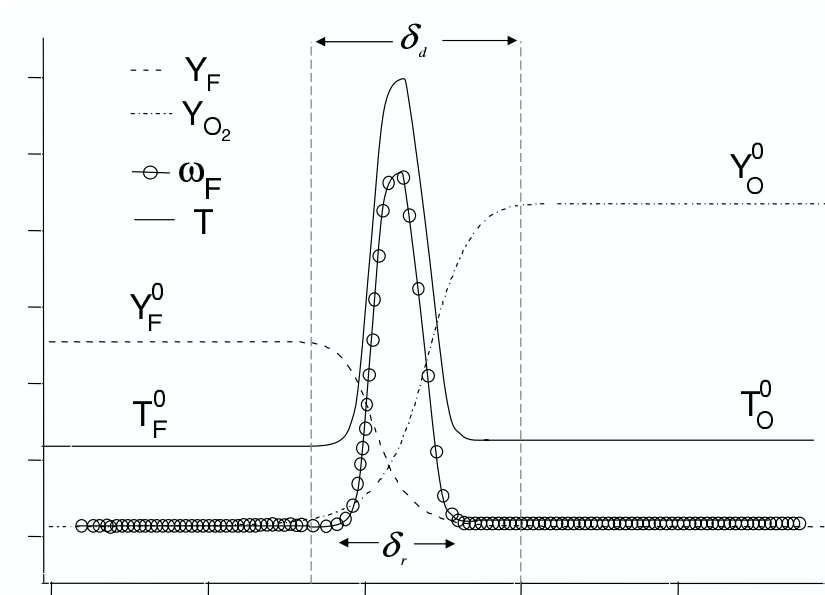


FIG. 2.4 – Structure d'une flamme laminaire de diffusion

La flamme de diffusion constitue une classe spécifique de la combustion où les réactifs ne sont pas mélangés avant de brûler. La structure d'une flamme laminaire de diffusion non étirée est représentée sur la Fig. 2.4 et met en évidence un certain nombre de considérations:

- Loin de part et d'autre de la flamme le mélange est soit trop riche, soit trop pauvre pour brûler. Le mélange le plus favorable est obtenu lorsque le fuel et l'oxygène sont présents dans les proportions stœchiométriques. La flamme de diffusion s'étend alors dans les zones où la diffusion crée un mélange stœchiométrique.
- Contrairement au cas prémélangé, la flamme laminaire de diffusion n'est pas stationnaire en l'absence d'étirement. Du fait de la diffusion dans la flamme, on observe une diminution du gradient des espèces et une augmentation de l'épaisseur de la zone réactive. De ce fait, le maximum du taux de réaction diminue lentement au cours du temps (d'un facteur $1/\sqrt{t}$).
- Pour la raison décrite dans le point précédent, une flamme de diffusion n'a pas d'épaisseur de référence, car son épaisseur est en constante évolution.
- Contrairement à la flamme de prémélange, la flamme de diffusion ne peut pas se propager dans l'écoulement (de part et d'autre de la flamme, l'un des réactifs est déficitaire), il n'existe donc pas de vitesse de référence de la flamme. En revanche, dans un écoulement turbulent la flamme de diffusion est plus sensible aux perturbations de vitesse que la flamme de prémélange.
- En terme d'applications industrielles, la combustion non prémélangée est plus sécuritaire, car la flamme ne se propage pas, par contre la combustion est moins efficace.

2.3.2 Influence de la turbulence

La modélisation des flammes de diffusion turbulentes est l'un des sujets les plus complexes en combustion. La plupart des mécanismes observés dans une flamme de prémélange turbulente sont également visibles dans une flamme de diffusion: flamme génératrice de turbulence (Section 2.1.2), diffusion, étirements, extinction, etc. Il existe aussi des phénomènes spécifiques aux flammes de diffusion:

- Les espèces se mélangent par diffusion vers le front de flamme avant de brûler et leur vitesse de diffusion peut être considérablement modifiée par les effets de la turbulence. Vu l'importance et la complexité du transport par diffusion dans ce type de flamme, la vitesse de réaction est souvent négligée (chimie infiniment rapide).
- Comme les flammes de diffusion sont plus sensibles à l'étirement que les flammes de prémélange, elles sont plus susceptibles de subir des extinctions locales et dans ce cas l'hypothèse de flammelette n'est plus justifiée.

Nous ne donnerons pas les détails de l'approche adoptée pour calculer les flammes de diffusion turbulentes. Nous nous limiterons à présenter les bases de cette approche, à savoir les modèles construits à partir d'un scalaire passif, que nous allons décrire.

2.3.3 Le scalaire passif

Si on considère une flamme de diffusion avec N espèces \mathcal{M}_k et une cinétique à une étape réversible:



Si on fait l'hypothèse que les diffusivités des espèces D_k sont égales ($D_k = D$), la fraction massique Y_k de chaque espèce suit l'équation de conservation suivante:

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho Y_k u_i) = \frac{\partial}{\partial x_i} \rho D \frac{\partial Y_k}{\partial x_i} + \dot{\omega}_k \quad (2.34)$$

Chaque espèce contient un certain nombre d'atomes ($C, O, H \dots$). La fraction massique d'un de ces éléments, noté Z_l pour $l = 1$ à M , M étant le nombre total d'éléments s'écrit:

$$Z_l = \sum_{k=1}^N a_{kl} \frac{W_l}{W_k} Y_k = W_l \sum_{k=1}^N a_{kl} \frac{Y_k}{W_k} \quad (2.35)$$

où a_{kl} est le nombre d'éléments de type l dans l'espèce k . Le nombre d'éléments se conservant au passage de la flamme, on a:

$$\sum_{k=1}^N a_{kl} (\nu'_k - \nu''_k) = 0 \quad (2.36)$$

Si on multiplie chacune des Eqs. (2.34) par $a_{kl}W_k/W_l$ et qu'on les somme, il en résulte une équation pour Z_l :

$$\frac{\partial \rho Z_l}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho Z_l u_i) = \frac{\partial}{\partial x_i} \rho D \frac{\partial Z_l}{\partial x_i} \quad (2.37)$$

Z_l est un scalaire passif, car il n'est pas affecté par la réaction au passage de la flamme, il est seulement convecté et diffusé dans le mélange. Il existe d'autres façons de construire un scalaire passif, par exemple en prenant la température et les fractions massiques [94,153] mais seulement quand le nombre de Lewis vaut 1.

La fraction de mélange

Il est possible de définir un scalaire normalisé à partir d'un quelconque scalaire passif et qui sera défini par le même jeu d'équations et de conditions aux limites. Soient Z_{l1} et Z_{l2} les valeurs dans les écoulements 1 et 2 respectivement, de part et d'autre de la flamme de diffusion. Nous pouvons définir la variable normalisée $z = \frac{Z_l - Z_{l2}}{Z_{l1} - Z_{l2}}$. L'équation de z s'écrit alors:

$$\frac{\partial \rho z}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho z u_i) = \frac{\partial}{\partial x_i} \rho D \frac{\partial z}{\partial x_i} \quad (2.38)$$

avec les conditions aux limites: $z = 1$ dans l'écoulement 1 et $z = 0$ dans l'écoulement 2, quelque soit le scalaire passif considéré. z est aussi un scalaire passif, appelé fraction de mélange. Une fois que z est connue, toutes les autres variables conservées peuvent être déduites.

La température peut aussi être choisie pour construire un scalaire passif.

2.3.4 La structure locale des flammelettes

La résolution de l'équation filtrée de la fraction de mélange z est une tâche aisée. Seulement, la détermination de z ne suffit pas pour connaître toutes les variables du problème. Une hypothèse supplémentaire est nécessaire pour en déduire les champs de température et de fractions massiques en fonction de z . Pour cela, un modèle doit être utilisé.

L'hypothèse de chimie infiniment rapide

Dans de nombreux cas, la réaction est très rapide comparée aux temps de diffusion. On peut alors supposer que les réactifs brûlent dès qu'ils sont en contact. En tout point de l'écoulement, l'équilibre chimique est atteint. Dans ce cas, les champs instantanés de la température et des fractions massiques sont fonctions de la seule fraction de mélange. Par exemple, dans le cas d'une

réaction irréversible à une étape:



On peut définir un scalaire passif: $Z = Y_F - Y_O/s$ avec $s = \nu_O W_O / (\nu_F W_F)$. Si l'écoulement 1 ne contient pas d'oxydant ($Y_{O1} = 0$ et $Y_{F1} = Y_F^0$) et si l'écoulement 2 ne contient pas de fuel ($Y_{F2} = 0$ et $Y_{O2} = Y_O^0$), la fraction de mélange z s'écrit:

$$z = \frac{sY_F - Y_O + Y_O^0}{sY_F^0 + Y_O^0} \quad (2.40)$$

Si la chimie est infiniment rapide, la flamme se situe dans la zone où les réactifs sont mélangés en proportion stœchiométrique ($Y_F = Y_O/s$ ou $Z = 0$). A cet endroit, $z = z_{st} = \frac{Y_O^0}{sY_F^0 + Y_O^0}$. Lorsque $z < z_{st}$ (dans l'écoulement 2), $Y_F = 0$ et Y_O est une fonction affine de z :

$$Y_O = sZ = \left(Y_F^0 + \frac{Y_O^0}{s} \right) (z_{st} - z) \quad (z < z_{st}) \quad (2.41)$$

Lorsque $z > z_{st}$ (dans l'écoulement 1), $Y_O = 0$ et Y_F est une fonction affine de z :

$$Y_F = Z = \left(Y_F^0 + \frac{Y_O^0}{s} \right) (z - z_{st}) \quad (2.42)$$

La température peut être définie de la même manière. Le résultat final donne la structure finale de la flamme (Fig. 2.3.4)

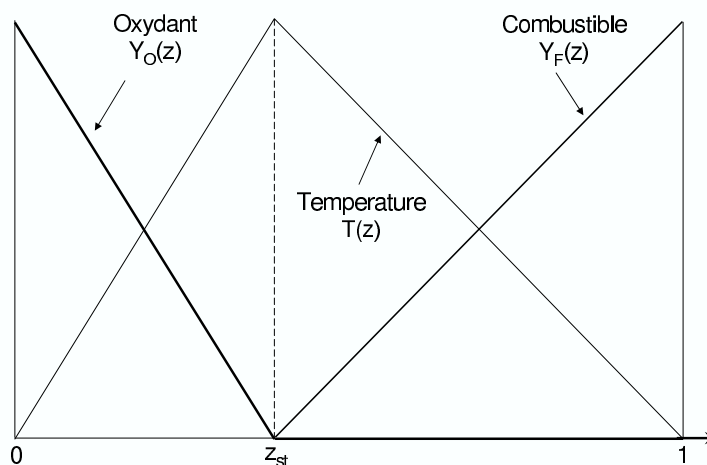


FIG. 2.5 – Structure de la flamme de diffusion avec l'hypothèse de chimie infiniment rapide.

Chimie non infiniment rapide

Lorsque les réactions contrôlant la flamme de diffusion ne sont pas irréversibles, le fuel et l'oxydant peuvent coexister sans brûler, même si la réaction chimique est infiniment rapide. Si elle

n'est plus infiniment rapide, la structure de la flamme devient plus complexe et dépend alors de la dissipation scalaire, notée χ :

$$\chi = 2D \left(\frac{\partial z}{\partial x_i} \right)^2 \quad (2.43)$$

Des relations explicites peuvent alors être formulées pour la température et les fractions massiques en fonction de la fraction de mélange et de la dissipation scalaire. Les effets de l'écoulement sur la structure de la flamme de diffusion sont généralement quantifiées à l'aide d'un nombre de Damköhler Da^{fl} comparant les échelles de temps de l'écoulement (ou du mélange) local τ_f et de la chimie τ_c . Le temps de mélange τ_f est associé à la dissipation scalaire qui mesure les gradients de la fraction de mélange et est directement lié au taux d'étirement. τ_f peut alors être estimé comme l'inverse de la dissipation scalaire à la stœchiométrie $\tau_f \approx 1/\chi_{st}$. Le nombre de Damköhler Da^{fl} s'écrit alors:

$$Da^{fl} = \frac{\tau_f}{\tau_c} \approx \frac{1}{\chi_{st}\tau_c} \quad (2.44)$$

χ_{st} est aussi utilisé pour estimer l'épaisseur diffusive de la flamme δ_d (voir Fig. 2.4):

$$\delta_d \approx \sqrt{\frac{D_{st}}{\chi_{st}}} \quad (2.45)$$

2.3.5 Les régimes de combustion en diffusion

Il est difficile de définir des régimes de combustion non prémélangée parce qu'une flamme de diffusion ne se propage pas et ne possède pas d'épaisseur fixe. La classification des régimes est d'abord basée sur la comparaison des échelles de temps caractéristiques de la turbulence et de la chimie avec le nombre de Damköhler $Da = \tau_t/\tau_c$.

Lorsque le nombre de Damköhler est petit ($Da < 1$), les échelles de la turbulence et la longueur de mélange sont plus petits que l'épaisseur de la flamme. Ces petits tourbillons intensifient le transport turbulent, et donc le mélange dans la zone de réaction. Ce régime est appelé régime de zones de réaction distribuées. Au contraire, si la combustion est rapide comparée au mélange, le nombre de Damköhler est grand ($Da > 1$) et l'effet de la turbulence sur le front de flamme est faible. C'est le régime de flammelette. Ces deux régimes sont représentés schématiquement sur la Fig. 2.6.

Une description de la structure de la flamme peut être apportée en comparant l'échelle intégrale l_t et l'épaisseur diffusive δ_d . Si on fait l'hypothèse que la flamme est étirée par les échelles de Kolmogorov [153], alors l'épaisseur diffusive est contrôlée par les plus petits tourbillons. L'épaisseur δ_d peut être estimée par: $\delta_d \approx \eta_k$. Le nombre de Damköhler s'exprime alors en fonction du

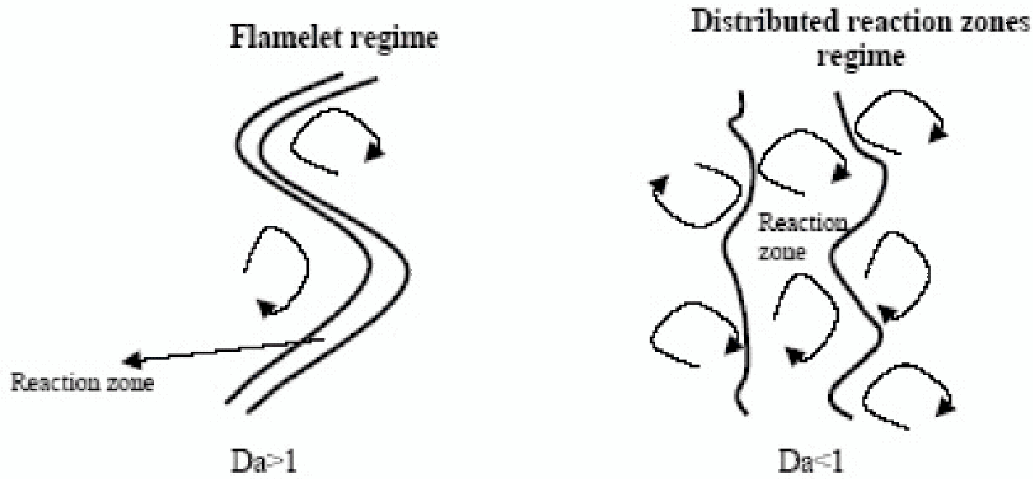


FIG. 2.6 – Effet de la turbulence sur la structure de la zone de réaction.

nombre de Reynolds turbulent $Re_t \approx (l_t/\delta_d)^{4/3}$:

$$Da = \frac{\tau_t}{\tau_c} \approx 2\sqrt{Re_t} Da^{fl} \quad (2.46)$$

Il est possible de classifier les régimes de combustion en fonction des nombres de Damköhler et Reynolds sur un diagramme log-log (Fig. 2.3.5). Quand la chimie est suffisamment rapide (grandes valeurs de Da), la flamme a une structure de flamme laminaire et le régime est le régime dit "de flammelette". Cette condition est délimitée par la droite $Da^{fl} = Da^{LFA}$. Les extinctions se produisent pour des temps chimiques grands, quand $Da^{fl} < Da^{ext}$.

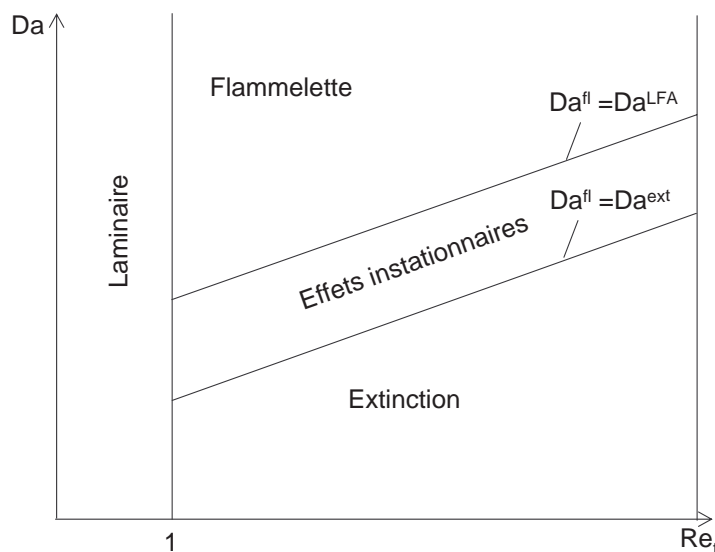


FIG. 2.7 – Représentation schématique des régimes de combustion turbulente non prémélangée [38].

2.4 Modélisation de la combustion turbulente non prémélangée

Nous ne présentons que les notions de base de l'approche classique pour le calcul numérique des flammes de diffusion. Cette approche est basée sur le modèle à scalaire passif. Il existe d'autres modèles incluant des modèles de flammelettes [110] que nous ne décrivons pas.

2.4.1 Les méthodes Pdf utilisant l'hypothèse de chimie infiniment rapide

Lorsque la chimie est infiniment rapide, le code résout les équations de conservation filtrées. Ces équations comprennent l'équation de continuité pour résoudre $\bar{\rho}$, les équations de quantité de mouvement pour connaître \tilde{u}_i et l'équation du scalaire passif pour connaître la fraction de mélange \tilde{z} . Pour modéliser la flamme de diffusion turbulente, deux approches sont possibles:

- Dans l'approche de la variable primitive, des hypothèses sont faites sur la structure de la flamme pour calculer les quantités:

$$\bar{\rho}\tilde{Y}_k(x,t) = \int_0^1 \rho(z)Y_k(z)pdf(z,x,t)dz \quad ; \quad \bar{\rho}\tilde{T}(x,t) = \int_0^1 \rho(z)T(z)pdf(z,x,t)dz \quad (2.47)$$

les relations $Y_k(z)$ et $T(z)$ peuvent être obtenues à partir de bibliothèques de flammelettes. La détermination de \tilde{Y}_k et \tilde{T} repose sur la détermination de la fonction densité de probabilité $pdf(z)$ de z . Cette fonction peut être soit présumée soit calculée à l'aide d'une équation de transport. Comme les équations de conservation des fractions massiques et de la température ne sont pas nécessaires, le terme source $\bar{\omega}_k$ n'a pas besoin d'être modélisé.

- Dans l'approche du taux de réaction, les équations pour les fractions massiques et la température sont résolues. Le taux de réaction $\bar{\omega}_k$ doit donc être modélisé. Les modèles peuvent être basés sur les bibliothèques de flammelette pour estimer $\dot{\omega}_k(z)$. Ensuite le taux de réaction filtré est obtenu par l'opération:

$$\bar{\omega}_k = \int_0^1 \dot{\omega}_k(z)pdf(z)dz \quad (2.48)$$

2.4.2 Les méthodes Pdf utilisant l'hypothèse de chimie non infiniment rapide

Lorsque la chimie n'est pas infiniment rapide, le taux de réaction instantané $\dot{\omega}_k$ dépend à la fois de la fraction de mélange z et de la dissipation scalaire χ [153]:

$$\dot{\omega}_k = -\frac{1}{2}\rho\chi\frac{\partial^2 Y_k}{\partial z^2} \quad (2.49)$$

Le taux de réaction filtré est alors donné par [34]:

$$\bar{\omega}_k(x,t) = \int_0^1 \int_{\chi} \dot{\omega}_k(z) p(z,\chi,x,t) dz d\chi \quad (2.50)$$

2.4.3 La combustion partiellement prémélangée: exemple de la flamme détachée (ou liftée)

Dans le cas où la flamme turbulente est détachée, il est courant d'observer une combustion partiellement prémélangée. La Fig. 2.8 représente schématiquement une flamme liftée. En augmentant la vitesse débitante du fuel, il est possible d'atteindre une valeur à partir de laquelle la flamme se détache et se stabilise derrière la zone de recirculation. La distance qui sépare la sortie de l'injecteur du plan où commence la flamme augmente lorsque la vitesse de sortie du fuel augmente. Lorsque la vitesse dépasse une valeur critique, la flamme est soufflée et ne peut plus se stabiliser dans la zone de mélange. A la base de la flamme, la combustion démarre dans un écoulement composé de fuel et d'oxygène qui se sont partiellement mélangés. Derrière la base de cette flamme turbulente, on peut voir se développer une flamme de diffusion. Une flamme triple peut être alors décelée dans la flamme liftée avec une branche de prémélange riche et une branche de prémélange pauvre. Une flamme de prémélange se propage le plus vite le long de la ligne stoechiométrique. Le bord le plus rapide, appelé point triple, se propage le long de la surface stoechiométrique. Une flamme de prémélange pauvre (du côté pauvre de cette surface) et une flamme de prémélange riche (du côté riche) se propagent avec une vitesse plus faible. La modélisation de ces flammes liftées nécessite à la fois une description des flammes de diffusion et des flammes de prémélange pour une large gamme de richesses. Dans un écoulement très perturbé, les deux branches de prémélange sont déformées et si les taux d'étirements sont suffisamment élevés, l'une de ces branches peut s'éteindre ou se replier vers la ligne de diffusion, tandis que l'autre branche continue de brûler. Pour cette raison le terme de flamme "arête" ("edge flame") est souvent plus approprié que flamme "triple".

En conséquence, au moins trois topologies différentes peuvent être rencontrées dans un brûleur:

- les flammes de diffusion (zone A sur la Fig. 2.8),
- les zones non réactives où le fuel et l'oxygène se mélangent pour créer un prémélange local (zone B sur la Fig. 2.8),
- les flammes partiellement prémélangées (zone C sur la Fig. 2.8) se propageant à travers le mélange créé dans les zones de type B.

Cette variété de topologies représente une nouvelle difficulté pour modéliser les interactions flamme/turbulence, car la plupart des modèles s'appuient sur de fortes hypothèses sur la to-

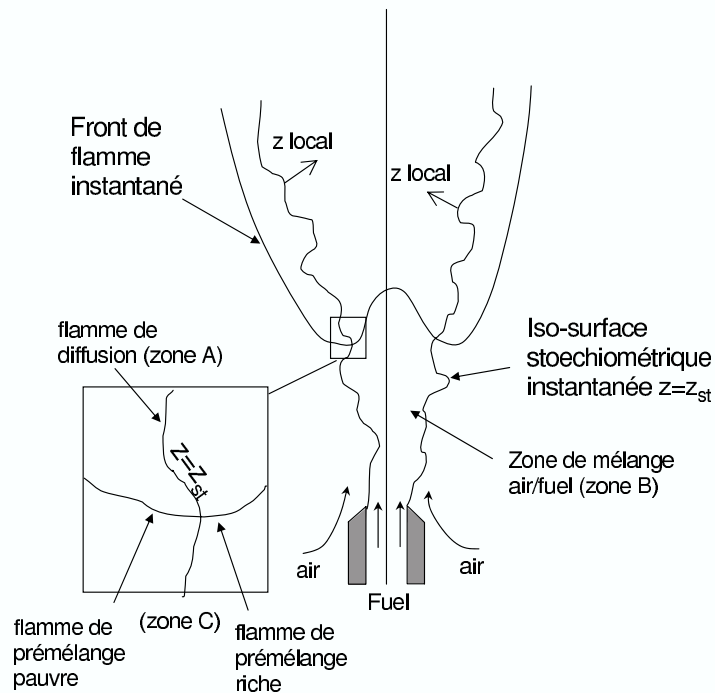


FIG. 2.8 – Représentation schématique d'une flamme détachée.

pologie: par exemple, si la chimie est supposée infiniment rapide, le mélange n'a pas le temps de se faire et la flamme se stabilise aux lèvres de l'injecteur où le fuel et l'air se rencontrent. Dans ce cas, seules des flammelettes de diffusion sont observées, ce qui n'est en réalité pas le cas. D'autre part, la réaction est suffisamment rapide pour démarrer avant que les espèces ne se soient complètement mélangées, de sorte que l'hypothèse de prémélange parfait ne peut être retenue. Les modèles valables en prémélange partiel sont généralement construits à partir d'approches hybrides [43,149]: un senseur identifie localement le régime de la flamme et le taux de réaction (ou les champs des espèces et de la température) est calculé à partir d'une combinaison de données sur les flammes de prémélange et de diffusion. Une approche différente est testée dans cette thèse, dans laquelle la connaissance de la topologie de la flamme n'est pas nécessaire pour construire le taux de réaction. Ce modèle est présenté dans la section 4.1.6.

Dans le cas d'un jet turbulent réactif non confiné, la position de stabilisation de la flamme liftée par rapport à l'écoulement incident reste encore objet de controverse. La flamme liftée est représentée, d'un point de vue schématique, sur la Fig. 2.9. La zone de réaction est presque parallèle à l'écoulement incident et le contour parabolique représente l'isotherme 600 K. L'abscisse de la base de la flamme est définie comme le point le plus en amont de l'isotherme. La condition

requis pour qu'une flamme prémélangée et liftée soit en équilibre est:

$$\bar{S}_b = \bar{U}_G \quad (2.51)$$

où \bar{U}_G est la vitesse moyenne suivant x des gaz frais à la base de la flamme et \bar{S}_b est la vitesse de propagation moyenne de la base de la flamme relativement à l'écoulement dans les gaz frais.

La condition requise pour que la flamme soit stable est:

$$\frac{d\bar{S}_b}{dx} > \frac{d\bar{U}_G}{dx} \quad (2.52)$$

Il existe plusieurs théories, qui tentent d'expliquer comment se propage la base de la flamme et de modéliser \bar{S}_b . Selon Kalghatgi [76], elle se propage avec une vitesse turbulente qui est contrôlée par l'intensité de la turbulence. En conséquence, la vitesse de propagation serait parfaitement corrélée avec la fluctuation rms de la vitesse mesurée juste en amont de la base. Des études expérimentales [191] contredisent cette théorie et mesurent des vitesses de propagation assez proches de la vitesse laminaire de flamme. Selon Miake-Lye et Hammer [125], les tourbillons des grandes échelles permettent à la flamme de se stabiliser en passant d'un tourbillon à l'autre. Cette théorie est aussi contredite [191] en montrant qu'il n'existe pas de corrélations significatives entre la vitesse de propagation de la flamme et le passage des grandes échelles. Dans une troisième théorie, la flamme est considérée comme une arête ou une courbe qui perturbe le champ de l'écoulement. Le dégagement de chaleur provoque une déviation des lignes de courants (Fig. 2.9) entre le point amont P et la base de la flamme B. La décélération de l'écoulement qui en résulte, favorise la stabilisation de la flamme. Cette théorie concorde avec les observations expérimentales [191].

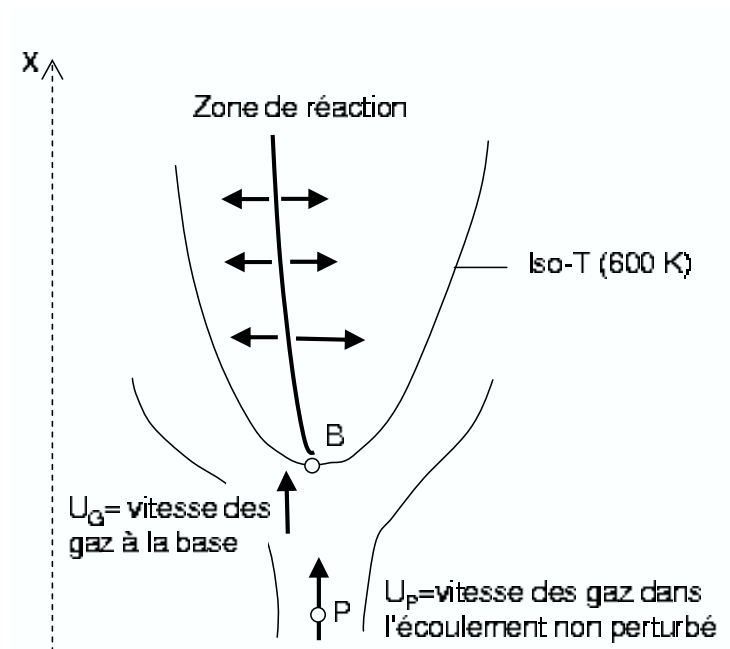


FIG. 2.9 – Schéma de la vitesse des gaz à la base (B) d'une flamme liftée et au point P dans la région non perturbée située en amont des lignes de courant divergentes. ΔU est l'écart entre ces deux vitesses.

Chapitre 3

Les schémas cinétiques réduits

3.1 Elements de thermochimie

Dans cette section, nous introduisons quelques aspects fondamentaux de la thermodynamique chimique et de la cinétique. Le sujet est vaste et décrire avec précision la thermochimie serait hors de propos. Le lecteur pourra se référer à la bibliographie [94,107,153].

3.1.1 Equilibre thermodynamique

La thermodynamique chimique se rapporte aux systèmes en équilibre, dans lesquels seuls les états initial et final sont concernés. Contrairement à la cinétique chimique, elle ne donne que les conditions à l'équilibre. Si on considère un système chimique avec N espèces et r réactions réversibles:

$$\sum_{k=1}^N \nu'_{kj} \mathcal{M}_{kj} \rightleftharpoons \sum_{k=1}^N \nu''_{kj} \mathcal{M}_{kj} \quad \text{pour } j = 1, r \quad (3.1)$$

\mathcal{M}_{kj} symbolise l'espèce k dans la réaction j , ν'_{kj} et ν''_{kj} sont les coefficients stœchiométriques de l'espèce k dans la réaction j . Si on considère chacune de ces réactions indépendamment, la condition d'équilibre peut être exprimée en fonction de chacune des variables thermodynamiques suivantes:

$$dU = TdS - pdV + \sum_{k=1}^N \zeta_k d\downarrow_k \quad (3.2)$$

$$dH = TdS + Vdp + \sum_{k=1}^N \zeta_k dnm_k \quad (3.3)$$

$$dF = -SdT - pdV + \sum_{k=1}^N \zeta_k dnm_k \quad (3.4)$$

$$dG = -SdT - Vdp + \sum_{k=1}^N \zeta_k dnm_k \quad (3.5)$$

où ζ_k est le potentiel chimique de l'espèce k et nm_k est le nombre de moles de l'espèce k par kilogramme de mélange. A pression (p) et température (T) fixées, l'énergie libre de Gibbs (G) est la fonction la plus simple à utiliser car elle dépend directement de T et p . L'état d'équilibre est définie par $dT = 0$, $dp = 0$ et $dG = 0$, de sorte que:

$$\sum_{k=1}^N \zeta_k dnm_k = 0 \quad (3.6)$$

En se plaçant dans le cas d'un gaz parfait, le potentiel chimique s'écrit:

$$\zeta_k = \left(\frac{\partial G}{\partial nm_k} \right)_{p, T, nm_j} = \zeta_k^0 - RT \ln \left(\frac{nm}{nm_k} \right) \quad \text{avec } k \neq j \quad (3.7)$$

En utilisant la variable d'avancement ξ , tel que $dnm_k = \nu_{kj}d\xi$, la formulation de la constante d'équilibre à la pression de référence p_0 peut être déduite des Eqs. (3.6) et (3.7):

$$K(p_0, T) = \prod_{k=1}^n \left(\frac{nm_k}{nm} \right)^{\nu_{kj}} = \exp \left(- \frac{\sum_{k=1}^n \nu_{kj} \zeta_k^0}{RT} \right) \quad (3.8)$$

En considérant la relation $\Delta G^0(T) = \Delta H^0(T) - T\Delta S^0(T)$, la constante d'équilibre s'écrit:

$$K(p, T) = \left(\frac{p_0}{p} \right)^{\sum_{k=1}^n \nu_{kj}} \exp \left(\frac{\Delta S^0(T)}{R} - \frac{\Delta H^0(T)}{RT} \right) \quad (3.9)$$

3.1.2 Cinétique chimique

Pour l'espèce k le taux de production $\dot{\omega}_k$ (en $\text{kg.m}^{-3}.\text{s}^{-1}$) est la somme des taux de réaction $\dot{\omega}_{kj}$ produits par chacune des réaction:

$$\dot{\omega}_k = \sum_{j=1}^r \dot{\omega}_{kj} = W_k \sum_{j=1}^r \nu_{kj} q_j \quad (3.10)$$

où q_j est le taux d'avancement de la réaction j (en $\text{mol.m}^{-3}.\text{s}^{-1}$):

$$q_j = r_j^f - r_j^b = k_j^f \prod_{k=1}^N \left(\frac{\rho Y_k}{W_k} \right)^{\nu'_{kj}} - k_j^b \prod_{k=1}^N \left(\frac{\rho Y_k}{W_k} \right)^{\nu''_{kj}} \quad (3.11)$$

où r_j^f et r_j^b sont respectivement les taux d'avancement direct et inverse de la réaction j . Les constante de réaction k_j^f et k_j^b sont généralement modélisées à l'aide d'une loi d'Arrhénius:

$$k_j^f = A_j T^\beta \exp \left(- \frac{E_a}{RT} \right) \quad (3.12)$$

où A_j^f est la constante pré-exponentielle, β est l'exposant pour la température et E_a est l'énergie d'activation qui peut aussi être formulée en terme de température: $E_a = RT_a$.

Le taux de dégagement de chaleur (en $\text{J.m}^{-3}.\text{s}^{-1}$) est alors calculé à partir des taux de production de chaque espèce selon la relation:

$$\dot{\omega}_T = \sum_{k=1}^N \Delta h_{f,k}^0 \dot{\omega}_k \quad (3.13)$$

On peut relier les constantes d'Arrhénius à la constante d'équilibre [94]:

$$\frac{k_j^f}{k_j^b} = K_c = K(p, T) \left(\frac{p}{RT} \right)^{\sum_{k=1}^n \nu_{kj}} \quad (3.14)$$

D'un point de vue moléculaire, chaque réaction correspond à un processus de collisions moléculaires dans lesquelles les atomes s'échangent. L'Eq. (3.11) signifie que la probabilité que les molécules se rencontrent est proportionnelle au produit des concentrations. Lorsque l'énergie des

collisions est suffisamment élevée, une réaction est possible. La quantité minimale d'énergie requise pour que la réaction se produise est l'énergie d'activation.

L'**énergie d'activation** est différente lorsqu'il s'agit de la réaction directe ou inverse, et la différence entre les deux valeurs est la chaleur de réaction ($Q = \sum_{k=1}^n \Delta h_{f,k}^0 \nu_k$) (Fig. 3.1). L'énergie d'activation chimique provient de l'excitation thermique des molécules et les réactions dans un gaz récupèrent l'énergie de la seule source disponible, l'énergie des collisions. La quantité E_a détermine l'augmentation de la constante de réaction lorsque la température augmente. La dépendance en température du taux de réaction permet de mesurer E_a dans un laboratoire. Ainsi, l'Eq. (3.12) montre que la probabilité que la réaction se produise ne dépend que de la température et du facteur A .

La **constante pré-exponentielle** modélise la fréquence des collisions et l'encombrement stérique de la molécule, i.e. l'importance de la géométrie et de l'orientation de la molécule dans une collision. Cette constante est beaucoup plus difficile à interpréter que l'énergie d'activation. Le facteur A est indépendant de la température: en effet à de très hautes températures, toutes les molécules ont suffisamment d'énergie pour réagir, mais elles doivent avoir l'orientation idéale et entrer en collision.

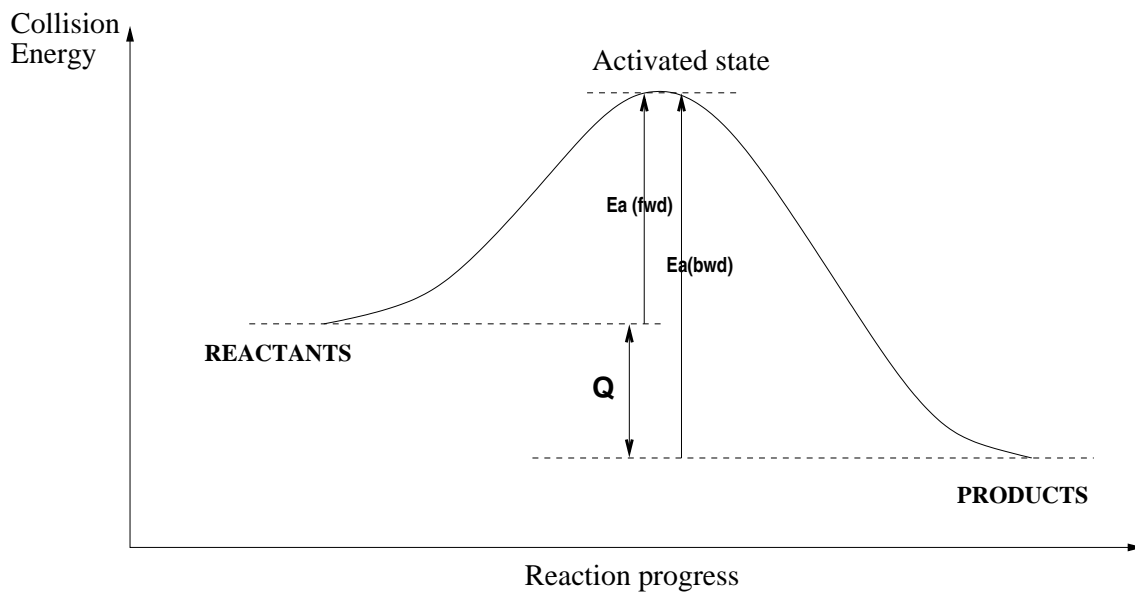


FIG. 3.1 – Diagramme de l'énergie d'activation.

Dans un schéma cinétique réduit, les exposants pour les espèces ν'_{kj} et ν''_{kj} sont considérés comme des paramètres à ajuster, ce qui permet d'améliorer la qualité du schéma cinétique. Dans ce cas, ces exposants sont notés n'_{kj} et n''_{kj} . Cependant, pour que l'état d'équilibre soit correct, il faut

vérifier la condition:

$$\nu_{kj} = \nu''_{kj} - \nu'_{kj} = n''_{kj} - n'_{kj} \quad (3.15)$$

3.1.3 Température et vitesse laminaire de flamme

Pour une flamme laminaire 1D de prémélange, il est possible d'estimer, à l'aide d'hypothèses simplificatrices, la température adiabatique (T_{ad}) et la vitesse laminaire (S_L) de flamme [153]. La température T_{ad} ne dépend que de l'équilibre final atteint, c'est à dire de la chaleur dégagée par la combustion. Dans une chimie simple à une étape, la quantité de chaleur dégagée dépend directement de la quantité de fuel consommée, ce qui s'exprime par $C_p \Delta T = \mathcal{Q} \Delta Y_F$, soit encore:

$$T_{ad} = T_1 + \frac{\mathcal{Q}}{C_p} \Delta Y_F \quad (3.16)$$

où la chaleur massique C_p est supposée constante. Cette estimation ne prend pas en compte l'influence des réactions endothermiques qui se produisent en réalité derrière le front de flamme et vont réduire T_{ad} , mais elle donne un ordre de grandeur.

Pour une flamme plane non étirée, la vitesse laminaire de flamme est aussi la vitesse de consommation du fuel:

$$S_L = - \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} \dot{\omega}_F dx}{\rho_1 (Y_F^1 - Y_F^2)} \quad (3.17)$$

Cette expression est basée sur le fait que toutes les espèces diffusent de la même façon.

3.2 La thermochimie dans AVBP

Dans un écoulement turbulent réactif, les inconnus sont définies sous leur forme conservative. Le vecteur des variables conservatives \mathbf{w} s'écrit:

$$\mathbf{w} = (\rho u, \rho v, \rho w, \mathcal{E}, \rho_k)^T \quad (3.18)$$

où ρ , u , v , w , \mathcal{E} et ρ_k sont respectivement la masse volumique, les trois composantes Cartésiennes du vecteur vitesse $\mathbf{u} = (u, v, w)^T$, l'énergie totale non chimique et la masse volumique de l'espèce k dans le mélange constitué de N espèces $\rho_k = \rho Y_k$.

3.2.1 Les variables thermodynamiques

L'énergie sensible ($e_{s,k}$) de l'espèce k est calculée à partir des tables thermodynamiques [180]:

$$e_{s,k}(T) = h_{s,k}(T) - r_k T = \int_{T_0=0K}^T C_{v,k} dT \quad (3.19)$$

où $h_{s,k}$ est l'enthalpie sensible, $C_{v,k}$ la chaleur massique à volume constant et r_k la constante de l'espèce k . L'énergie sensible du mélange est déduite en utilisant la relation $\rho = \sum_{k=1}^N \rho_k$:

$$\rho e_s = \sum_{k=1}^N \rho_k e_{s,k} = \rho \sum_{k=1}^N Y_k e_{s,k} \quad (3.20)$$

L'énergie totale non chimique \mathcal{E} est alors la somme des énergies cinétique e_c et sensible e_s du mélange:

$$\mathcal{E} = \rho E = \rho (e_c + e_s) = \rho \left(\frac{1}{2} (u^2 + v^2 + w^2) + \sum_{k=1}^N Y_k e_{s,k} \right) \quad (3.21)$$

Les chaleurs massiques C_p et C_v dépendent aussi de la composition du mélange:

$$C_p = \sum_{k=1}^N Y_k C_{p,k} \quad \text{et} \quad C_v = \sum_{k=1}^N Y_k C_{v,k} \quad (3.22)$$

3.2.2 Equation d'état

L'équation d'état pour un gaz parfait s'écrit:

$$p = \rho r T \quad (3.23)$$

où r dépend de la composition locale du mélange, dont la masse molaire W est définie par:

$$\frac{1}{W} = \sum_{k=1}^N \frac{Y_k}{W_k} \quad (3.24)$$

Ainsi, la constante des gaz r s'écrit:

$$r = \frac{R}{W} = R \sum_{k=1}^N \frac{Y_k}{W_k} = \sum_{k=1}^N Y_k r_k \quad (3.25)$$

R est le constant des gaz parfaits.

3.2.3 Les coefficients de transport

La viscosité dynamique μ est supposée indépendante de la composition du mélange gazeux. Elle est calculée à l'aide d'une loi en puissance:

$$\mu = C \left(\frac{T}{T_{ref}} \right)^b \quad (3.26)$$

C et b sont des constantes à ajuster.

Le nombre de Prandtl qui compare la viscosité cinématique des gaz et la conductivité thermique est supposé constant:

$$Pr = \frac{\nu}{\frac{\lambda}{\mu C_p}} \quad (3.27)$$

Le nombre de Schmidt des espèces $S_{c,k}$ qui compare la viscosité cinématique des gaz et la diffusivité moléculaire D_k des espèces, est également supposé constant:

$$S_{c,k} = \frac{\nu}{D_k} \quad (3.28)$$

En conséquence, le nombre de Lewis qui compare la diffusivité thermique et la diffusivité moléculaire de chaque espèce est constant et égal à:

$$Le,k = \frac{S_{c,k}}{Pr} = \frac{\lambda}{\rho C_p D_k} = \frac{D_{th}}{D_k} = cste \quad (3.29)$$

3.3 La combustion des hydrocarbures

De plus en plus souvent, on a besoin de prendre en compte dans les calculs CFD une description détaillée des processus chimiques :

- la prédiction des émissions polluantes (NO, CO, CO₂,...),
- la validation par comparaison avec des mesures expérimentales de radicaux (CH, OH, CH₂O,...),
- une meilleure prédiction des résultats (couplage chimie/écoulement turbulent).

La seule méthode exacte est de considérer un schéma cinétique complet. Actuellement de nombreux schémas cinétiques complets sont disponibles pour les combustibles les plus communs tels que l'hydrogène ou les hydrocarbures légers. Ces schémas comprenant généralement quelques centaines de réactions et d'espèces, représentent des modèles de combustion réalistes et fiables. Cependant d'un point de vue numérique, ces schémas sont extrêmement coûteux en terme de temps de calcul et de mémoire et leur application est réduite à une analyse qualitative ou à la simulation de flammes laminaires 1D. A titre d'exemple, pour le calcul d'une flamme laminaire 1D, le code standard PREMIX [78] nécessite déjà plus d'1 Go de mémoire et une heure de calcul pour seulement 200 espèces. Par conséquent, l'objectif est de les simplifier afin de formuler des schémas réduits qui soient suffisamment réalistes pour fournir des informations valables concernant la structure de la flamme, l'émission de polluants et les effets de la cinétique chimique sur la structure des flammes turbulentes. Des méthodes alternatives existent, qui ne se basent pas réellement sur un schéma explicite (réseau de neurones, base de données tabulées,...).

3.3.1 Les schémas cinétiques complets

Plusieurs schémas cinétiques sont disponibles pour le méthane (GRI-Mech 3.0 (www.me.berkeley.edu/gri_mech/ et www-cms.llnl.gov/combustion/combustion2.html), [31,106]) ou pour le propane [143]. Ces schémas décrivent le chemin réactionnel, c'est-à-dire les différentes étapes de la combustion des hydrocarbures : l'amorçage, la propagation et la terminaison. De nombreux radicaux apparaissent au sein de la flamme sur des distances souvent parfois plus courtes que l'épaisseur de flamme. La combustion d'un hydrocarbure ne peut être décrite par un mécanisme unique, car le chemin réactionnel change lorsque les conditions varient. Si la température des gaz frais est modifiée, la réaction d'initiation sera modifiée. L'augmentation de la richesse d'un mélange pauvre conduit à une augmentation de la température adiabatique de flamme et la composition des gaz brûlés est modifiée. Une fois qu'un schéma complet a été validé par comparaisons avec l'expérience, il sert de référence pour le développement de schémas cinétiques réduits.

3.3.2 Développement d'un schéma cinétique réduit

Plusieurs méthodes existent pour formuler un schéma cinétique réduit [177]. L'objectif est de les simplifier pour formuler des schémas réduits, qui représentent un bon compromis entre faisabilité numérique et prédiction de la physique.

- D'un point de vue physique,
 - La température de fin de combustion doit être correctement prédite. Dans la réalité, des réactions de dissociations apparaissent derrière le front de flamme lorsque le mélange est riche. Ces réactions endothermiques conduisent à une diminution de la chaleur dégagée lors de la combustion et donc à une diminution de la température de fin de combustion. Un schéma cinétique à une étape ne peut pas prendre en compte ces dissociations. Il est donc utile de les englober dans un schéma réduit multi-réactions (ou multi-étapes).
 - La vitesse laminaire de la flamme doit aussi être reproduite. Celle-ci étant directement liée à la vitesse de consommation du carburant, elle joue un rôle essentiel dans l'étude de la propagation et de l'étirement de la flamme en combustion turbulente comme dans l'étude des instabilités de combustion. En particulier, la vitesse de flamme diminue lorsque le fuel est en excès, à cause de l'existence de réactions subsidiaires. Un tel phénomène peut-être modélisé dans un schéma réduit multi-étapes.
 - Le schéma cinétique peut aussi englober des espèces intermédiaires (tels que CO et H₂), prédire la formation de polluants (tels que NO_x) et la composition des gaz brûlés

(CO_2 , H_2O).

- Certaines configurations nécessitent une bonne prédiction des phénomènes instationnaires telles que l'extinction (par exemple, à cause de l'étirement de la flamme) et les temps d'allumage de la flamme.
- D'un point de vue numérique, le modèle cinétique doit rester assez simple pour réduire le temps de calcul et pour faciliter la convergence numérique.

Pour construire un schéma cinétique réduit, on se base sur un schéma détaillé. On utilise un tel schéma pour calculer une flamme avec un code 1D, afin d'obtenir les principales caractéristiques (température de fin de combustion, vitesse laminaire de flamme, profils des espèces) sur une gamme de richesse et de pression. Chaque réaction est modélisée à l'aide d'une loi d'Arrhenius faisant intervenir des paramètres cinétiques qui quantifient la dépendance en température (quantité d'énergie nécessaire pour que la réaction se produise) et l'affinité des produits entre eux. Ces paramètres contrôlent la vitesse de consommation des produits et les profils des espèces. Différentes méthodes existent pour aboutir à un schéma cinétique réduit à partir de schémas complets, que l'on peut classer en trois catégories: les méthodes classiques, les méthodes "ad-hoc" et les méthodes récentes.

Les méthodes classiques

Les réactions et les espèces les plus importantes sont extraites en se basant sur les approches suivantes :

- l'état quasi-stationnaire (lorsque les taux de consommation et de production d'une espèce sont en équilibre, soit $\dot{\omega}_k \approx 0$),
- l'équilibre partiel (lorsque les taux d'avancement direct et inverse d'une réaction infiniment rapide sont équilibrés, soit $r_j^f \approx r_j^b$),
- une étude de sensibilité, au cours de laquelle on calcule de quelle manière un changement des paramètres réactionnels (constantes d'Arrhénius) modifie le résultat global d'un calcul 0D, ou bien quel est le poids des différentes réactions dans la production totale d'une espèce. Ceci permet de montrer que certaines réactions n'ont pratiquement aucune influence sur le résultat global, et peuvent donc être négligées. Au contraire, des réactions essentielles qui contrôlent en pratique les résultats sont identifiées et doivent être conservées dans le schéma réduit. On identifie alors des chemins réactionnels particulièrement importants.

Ces méthodes ont deux points communs :

- elles nécessitent d'excellentes compétences en chimie et cinétique chimique,
- les schémas cinétiques réduits qui en résultent, présentent une plage de validité limitée (sur

la richesse, la pression, la température des gaz frais, le délai d'auto-inflammation, le type de combustion (prémélange, diffusion)...

Les méthodes "ad hoc"

La construction d'un schéma cinétique réduit peut aussi se faire en utilisant une méthode "ad hoc" qui ne nécessite pas de connaissances pointues en cinétique:

- L'adaptation des paramètres. En pratique, il s'agit de choisir un schéma cinétique réduit en s'appuyant sur une étude de sensibilité ou sur la littérature et d'adapter les constantes d'Arrhénius des différentes réactions pour reproduire correctement un certain nombre de propriétés choisies (La température de fin de combustion, la vitesse laminaire de flamme, l'écart limite d'extinction, les niveaux d'émission de polluants).
- Le schéma global. La combustion est décrite par une réaction globale: $\nu_F F + \nu_{O_2} O_2 \longrightarrow \nu_P P$. Dans ce cas, il n'y a que 4 paramètres à adapter (la constante pré-exponentielle, l'énergie d'activation et les exposants pour les réactifs (F), oxygène (O_2)).

Les méthodes récentes

De nouvelles méthodes peuvent être employées:

- CSP (computational singular perturbation) [96,115],
- ILDM [114],
- FPI (Flame propagation of ILDM) [63] et FGM (flamelet-generated manifolds) [193],
- Méthodes in situ [202],
- Réseau de neurones ou ANN (artificial neural networks) [25].

Ces méthodes sont basées soit sur des techniques de réduction (CSP) soit sur des techniques de tabulation (bibliothèques de flammes laminaire 1D). Elles ont pour objectif de réduire les temps de calcul, tout en permettant une bonne précision quant à la description de la flamme (structure, vitesse de flamme). Certaines méthodes, comme ILDM et FPI peuvent être couplées aux codes CFD.

3.4 Un exemple de schéma cinétique réduit à 2 étapes pour le propane: le schéma 2S-KT1

Pour une flamme à 1 bar et 300 K, le schéma cinétique 2S-KT1, prend en compte six espèces (C_3H_8 , O_2 , CO_2 , CO , H_2O et N_2) et deux réactions:



La première réaction (3.30) est irréversible, alors que la deuxième (3.31) mène à un équilibre entre CO et CO_2 dans les gaz brûlés et permet de mieux prédire la dissociation de CO_2 et la température en fin de combustion. Les taux d'avancement des réactions sont calculés respectivement par:

$$q_1 = A_1 \left(\frac{\rho Y_{C_3H_8}}{W_{C_3H_8}} \right)^{n_{1F}} \left(\frac{\rho Y_{O_2}}{W_{O_2}} \right)^{n_{1O}} \exp \left(-\frac{E_{a1}}{RT} \right) \quad (3.32)$$

$$q_2 = A_2 \left[\left(\frac{\rho Y_{CO}}{W_{CO}} \right)^{n_{2CO}} \left(\frac{\rho Y_{O_2}}{W_{O_2}} \right)^{n_{2O}} - \left(\frac{\rho Y_{CO_2}}{W_{CO_2}} \right)^{n_{2CO_2}} \right] \exp \left(-\frac{E_{a2}}{RT} \right) \quad (3.33)$$

Les paramètres chimiques sont donnés dans la Tableau 3.1. Les nombres de Schmidt des espèces $S_{c,k}$ utilisés dans la simulation sont fournis dans le Tableau 3.2. Le nombre de Prandtl est fixé à 0.68.

A_1	n_{1F}	n_{1O}	E_{a1}	A_2	n_{2O}	n_{2CO}	n_{2CO_2}	E_{a2}
$1.5E + 10$	0.77	0.7044	20812	$1.0E + 10$	1.0	0.5	1.0	19900

TAB. 3.1 – Constantes de réaction du schéma 2S-KT1. Les énergies d'activation sont en cal. moles⁻¹ et les constantes pré-exponentielles sont en unités cgs.

Espèces	C_3H_8	O_2	CO	CO_2	H_2O	N_2
S_c^k	1.247	0.732	0.742	0.940	0.545	0.703

TAB. 3.2 – Nombres de Schmidt utilisés avec le schéma 2S-KT1.

Pour valider le code et le schéma cinétique, des flammes de prémélange laminaire 1D ont été calculées avec le code AVBP et comparées aux flammes obtenues avec PREMIX [78,79]. La comparaison entre les deux codes du schéma à deux étapes permet une validation des modèles de thermochimie et de transport utilisés dans AVBP. Les profils obtenus avec les deux codes et le même schéma cinétique sont présentés sur les Figs. 3.2(a) et 3.2(b). L'accord est excellent. La comparaison avec le schéma détaillé de Peters [143] et le schéma 2S-KT1 permet d'évaluer la justesse du schéma à deux étapes. La température de flamme est correctement prédite (Fig. 3.3(a)) par le schéma 2S-KT1. La vitesse laminaire de flamme est également bien prédite du côté pauvre (à partir de $\Phi = 0.6$) mais s'éloigne du résultat exact pour les cas riches $\Phi > 1.2$), comme on peut le voir sur la Fig. 3.3(b). Néanmoins de meilleures performances ne sont pas envisageables avec un schéma à deux étapes à moins de causer des difficultés numériques (par l'utilisation d'exposants petits ou négatifs). Enfin, les fractions massiques des produits pour les schémas 2S-KT1 et Peters sont tracées sur la Fig. 3.4. Les estimations sont très correctes même pour les cas riches. Le schéma 2S-KT1 est utilisé dans l'étude du brûleur ICLEAC (Partie III).

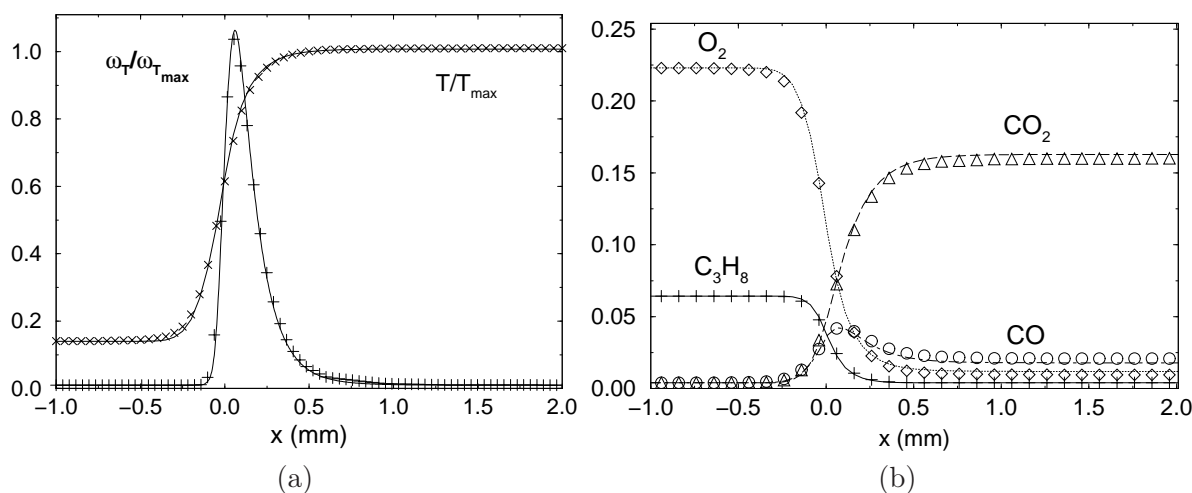


FIG. 3.2 – Structure de la flamme laminaire 1D à la stœchiométrie: (a) Profils du taux de dégagement de chaleur et de la température, (b) Profils des fractions massiques. Lignes=AVBP, symboles=PREMIX.

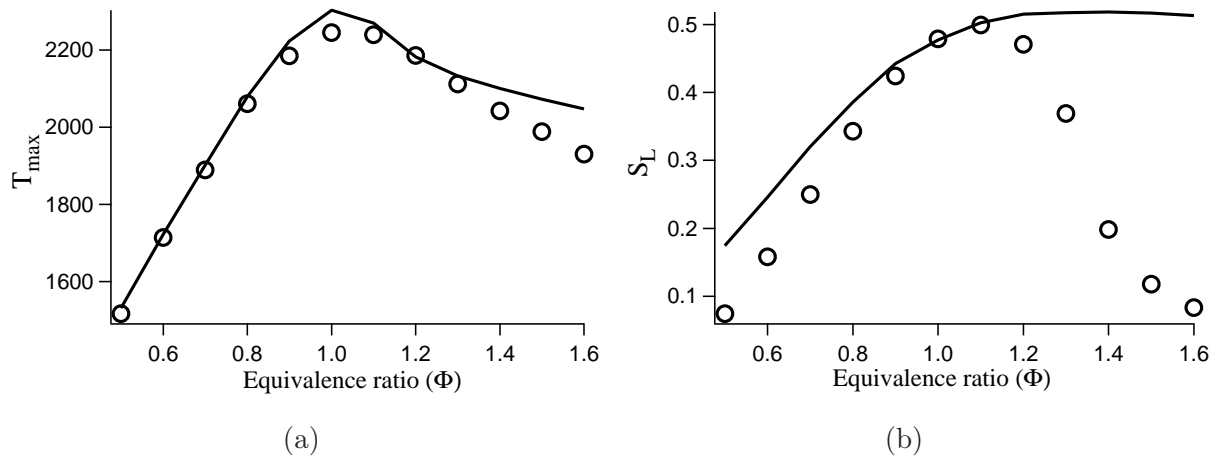


FIG. 3.3 – (a) Température adiabatique de flamme (K) en fonction de la richesse. (b) Vitesse laminaire de flamme (m/s) en fonction de la richesse. (—) 2S-KT1 et \circ schéma détaillé de Peters [143]. Les résultats sont obtenus avec PREMIX.

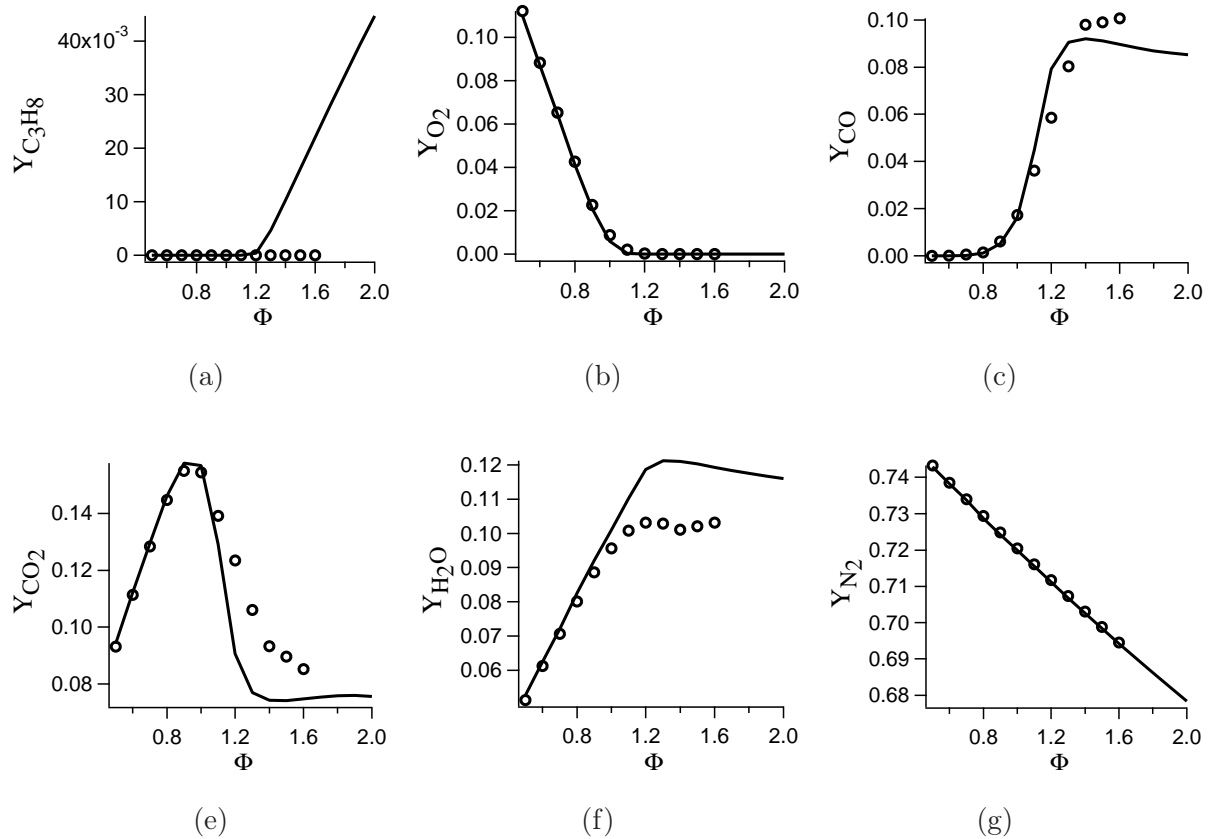


FIG. 3.4 – Fractions massiques des produits de la réaction en fonction de la richesse pour une flamme laminaire 1D prémélangée. (—) 2S-KT1 et \circ schéma détaillé de Peters [143]. Les résultats sont obtenus avec PREMIX.

3.5 Un exemple de schéma cinétique réduit pour le méthane: le schéma à 4 étapes J&L

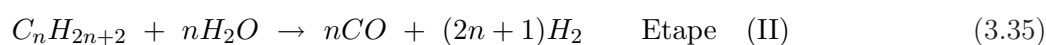
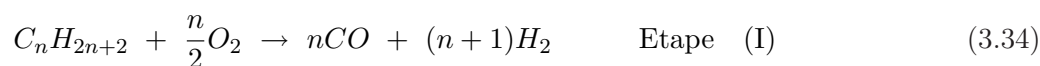
3.5.1 Description du mécanisme

Dans les travaux présentés dans ce mémoire, nous cherchons principalement à reproduire la température adiabatique de flamme et la vitesse laminaire de flamme pour une large gamme de richesses. Les schémas globaux, bien que séduisants pour leur simplicité, sont néanmoins souvent incapables de reproduire ces caractéristiques lorsque le milieu est riche, à moins d'ajouter des difficultés numériques (exposant négatif pour le fuel, par exemple).

Dans une configuration non prémélangée, l'utilisation d'un schéma global semblait donc exclue. Nous nous sommes attachés à trouver un schéma cinétique réduit qui restait simple (peu d'espèces et peu de réactions) pour éviter les calculs trop coûteux et les solutions trop lourdes. Le schéma à 4 étapes proposé par Jones et Lindstedt [75] présente toutes les qualités requises pour un calcul réactif partiellement prémélangé dans une configuration complexe:

- Il ne comporte que 7 espèces et 4 réactions,
- Il peut être généralisé pour les alcanes du méthane (CH_4) au butane (C_4H_{10}),
- Il est valable sur une large gamme de richesses et de températures et ajustable pour des pressions de fonctionnement comprises entre 0.2 à 10 bar.

Jones et Lindstedt étaient soucieux de reproduire les niveaux de H_2 et CO dans les flammes ainsi que d'autres caractéristiques telles que la vitesse laminaire de flamme. En se basant sur des schémas détaillés et en cherchant à éliminer des espèces intermédiaires, ils ont construit des expressions algébriques simples pour modéliser les taux de réactions. Le schéma cinétique comprend 7 espèces (CH_4 , O_2 , CO_2 , CO , H_2 , H_2O , N_2), 2 réactions irréversibles pour la consommation du fuel et 2 réactions réversibles:



Le schéma cinétique a été construit en se basant sur une description simplifiée de la structure de flamme (Fig. 3.5). En effet, la flamme est décomposée en deux parties. Dans la première (Eqs. (3.34) et (3.35)), le fuel est converti en CO et H₂ (cette zone correspond à la consommation du fuel). La seconde partie (Eqs. (3.36) et (3.37)) comprend l'oxydation en eau et en dioxyde de carbone. Les taux de réaction sont formulés comme suit:

$$r_1^f = k_1^f \cdot [C_n H_{2n+2}]^{\frac{1}{2}} \cdot [O_2]^{\frac{5}{4}} \quad (3.38)$$

$$r_2^f = k_2^f \cdot [C_n H_{2n+2}] \cdot [H_2O] \quad (3.39)$$

$$r_3^f = k_3^f \cdot [H_2]^{\frac{1}{4}} \cdot [O_2]^{\frac{3}{2}} \quad (3.40)$$

$$r_4^f = k_4^f \cdot [CO] \cdot [H_2O] \quad (3.41)$$

Les taux de réactions inverses sont obtenus à partir des relations d'équilibre:

$$r_3^b = k_3^b \cdot [H_2]^{-\frac{3}{4}} \cdot [O_2] \cdot [H_2O] \quad (3.42)$$

$$r_4^b = k_4^b \cdot [CO_2] \cdot [H_2] \quad (3.43)$$

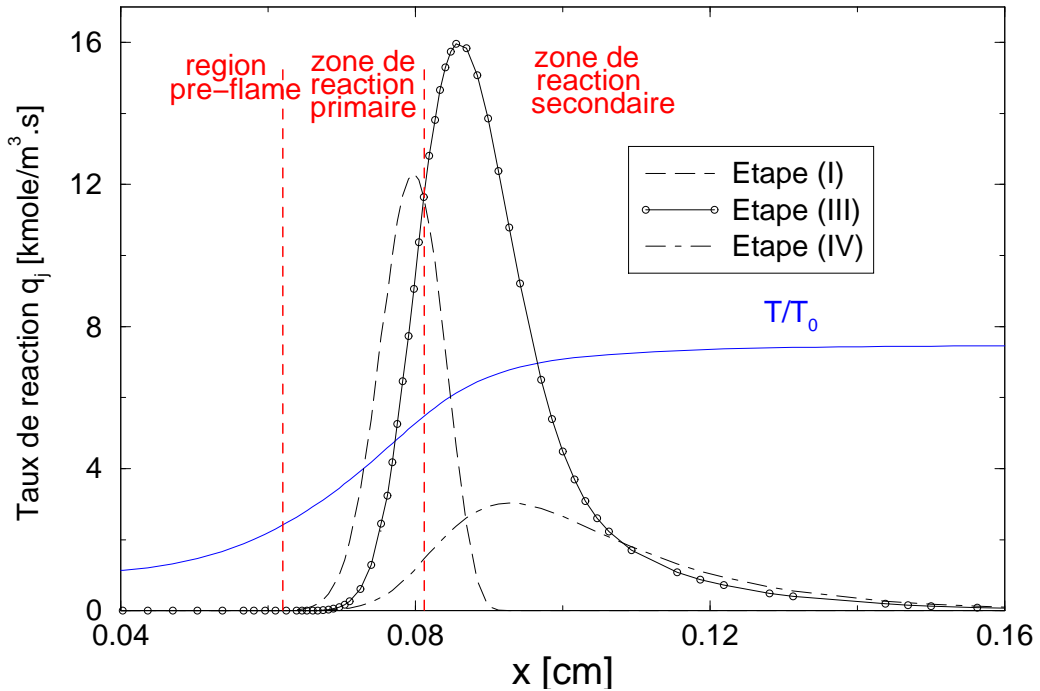


FIG. 3.5 – Structure de la flamme stœchiométrique pour le schéma J&L. Les taux de réaction et la température normalisée sont tracés.

Pour une flamme à 2 bar et 650 K, les paramètres cinétiques sont donnés dans le Tableau 3.3. Les nombres de Schmidt des espèces sont donnés dans le Tableau 3.4. Le nombre de Prandtl est fixé à 0.66.

Reaction	A	β	E
(1)	4.471 10 ¹³	0.0	30000
(2)	1.714 10 ¹¹	0.0	30000
(3)	6.909 10 ¹⁷	-1.0	40000
(4)	1.571 10 ¹²	0.0	20000

TAB. 3.3 – Constantes des taux de réactions directs ($k^f = A.T^\beta.e^{-\frac{E}{RT}}$) pour le schéma J&L à 2 bar et 650 K. Les énergies d'activation sont en cal. moles⁻¹ et les constantes pré-exponentielles sont en unités cgs.

Espèces	CH ₄	O ₂	CO	H ₂	CO ₂	H ₂ O	N ₂
S_c^k	0.679	0.742	0.751	0.203	0.945	0.545	0.731

TAB. 3.4 – Nombres de Schmidt utilisés avec le schéma J&L.

Pour valider le code et le schéma, des flammes laminaires de prémélange 1D ont été calculées avec AVBP et comparées à PREMIX [78,79]. La comparaison entre les deux codes pour le schéma J&L permet de valider la thermochimie et les modèles de transport dans AVBP. La comparaison avec le schéma détaillé GRI-Mech 3.0 ([www.me.berkeley.edu / gri_mech](http://www.me.berkeley.edu/gri_mech)), utilisé dans PREMIX, permet de vérifier la précision du schéma J&L (voir sections 3.5.2 et 3.5.3).

3.5.2 Structure de la flamme

Les profils d'une flamme stœchiométrique obtenus avec AVBP et PREMIX sont comparés, en traçant les fractions molaires (Fig. 3.6), la température et le taux de dégagement de chaleur (Fig. 3.7). Les comparaisons sont excellentes. Les espèces majoritairement produites lors de la combustion sont CO₂ et H₂O, alors que CO et H₂ sont des espèces intermédiaires, dont les niveaux atteignent un maximum dans la flamme.

La comparaison des profils de fractions molaires obtenus avec PREMIX pour le schéma détaillé GRI-Mech 3.0 et pour le schéma réduit J&L (Fig. 3.8) permet d'évaluer la précision du schéma J&L:

- Les niveaux maximum de H₂ et CO dans la flamme sont consistants. On observe une légère surestimation du pic de production, et ensuite l'équilibre est atteint un peu trop vite dans la zone post-flamme.
- Les profils des espèces sont correctement reproduits par le schéma J&L. Pour plus de clarté, les graphes de la Fig. 3.8 sont focalisés au niveau de la flamme. L'état d'équilibre, atteint

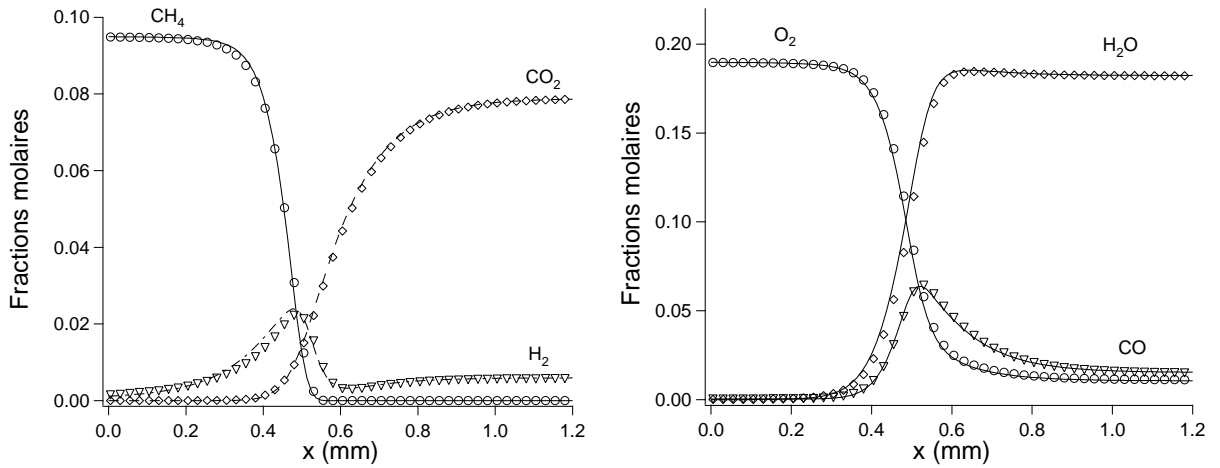


FIG. 3.6 – Structure d’une flamme laminaire 1D stœchiométrique obtenue avec le schéma J&L. Profils des espèces. Symboles: PREMIX et —: AVBP.

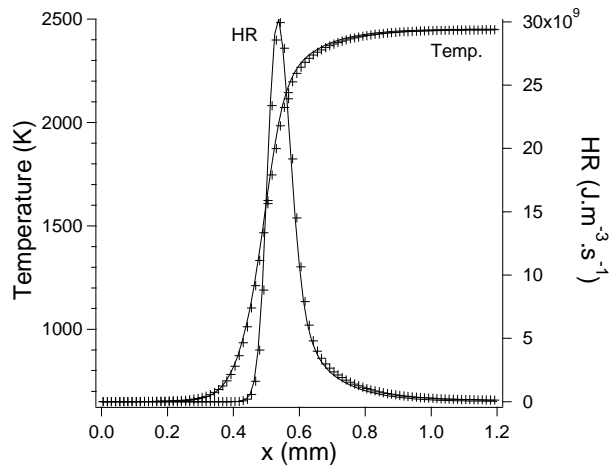


FIG. 3.7 – Structure d’une flamme laminaire 1D stœchiométrique obtenue avec le schéma J&L. Profils de la température (T) et du taux de dégagement de chaleur (HR). Symboles: PREMIX et —: AVBP.

plus en aval dans les gaz brûlés, n’est pas visible. Les erreurs relatives des fractions molaires à l’équilibre (dans les gaz brûlés) sont récapitulées dans le Tableau 3.5.

Espèces	O_2	H_2O	H_2	CO_2	CO
Erreur en %	1	0.26	0.3	0.6	0.04

TAB. 3.5 – Erreurs relatives sur les fractions molaires en fin de combustion d’une flamme 1D stœchiométrique avec le schéma cinétique J&L par rapport au schéma GRI-Mech 3.0.

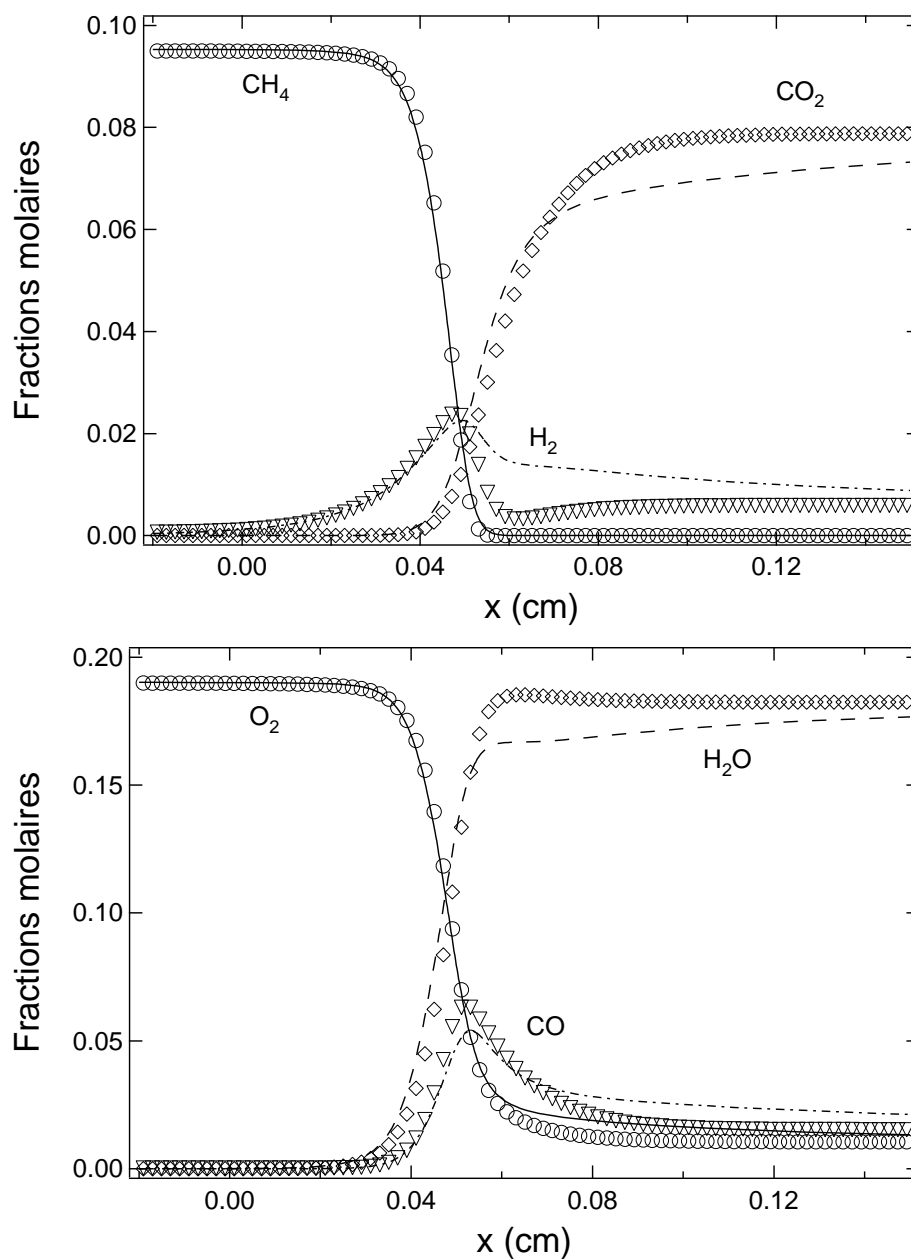


FIG. 3.8 – Profils d’espèces dans la flamme stœchiométrique ($p_1 = 2$ bar et $T_1 = 650$ K). Traits = GRI-Mech 3.0; symboles = J&L.

3.5.3 Influence de la richesse

La température est très bien prédite par le schéma J&L (Fig. 3.9). Du côté riche, les dissociations de H_2O en H_2 et de CO_2 en CO sont suffisantes pour reproduire la diminution de la température. On constate même une légère sous-estimation de la température à partir de $\Phi = 1.6$ par rapport au schéma GRI-Mech 3.0. D'autre part, l'accord entre AVBP et PREMIX est excellent.

Malgré une surestimation de la vitesse de flamme du côté riche (Fig. 3.10), le schéma J&L prédit la diminution de la vitesse, ce qui n'est pas le cas pour des schémas plus simples. En effet, la réaction d'oxydation de H_2 permet de réduire la vitesse de consommation du méthane. On remarque un léger décalage entre AVBP et PREMIX, du fait que les nombres de Schmidt et Prandtl sont constants dans AVBP.

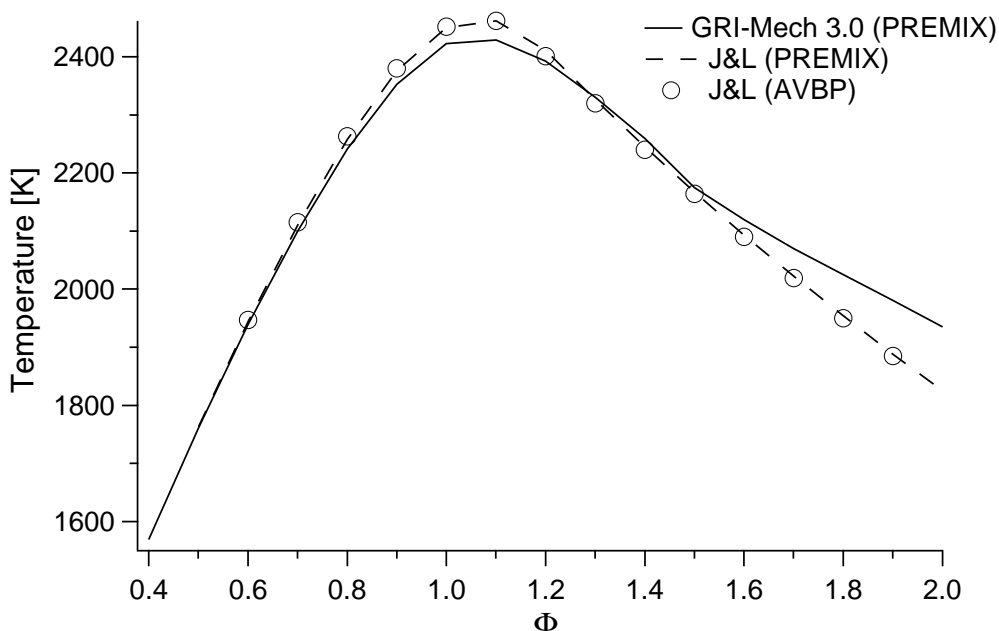


FIG. 3.9 – Température adiabatique de flamme (K) en fonction de la richesse. AVBP pour le schéma J&L ($P_1 = 2$ bar et $T_1 = 650$ K) est comparé à PREMIX pour le schéma J&L et le schéma détaillé GRI-Mech 3.0.

La prédiction des fractions massiques dans les gaz brûlés est présentée sur la Fig. 3.11. Les estimations sont excellentes jusqu'à $\Phi = 1.6$. Ensuite, une légère déviation apparaît pour CO , H_2O et H_2 par rapport aux valeurs de référence (schéma GRI-Mech 3.0), tout comme la température. En effet dans les flammes réelles, le méthane est totalement consommé pour des richesses supérieures à la stœchiométrie, typiquement $\Phi = 1.6$. Des réactions de dissociations ont lieu derrière le front de flamme et continuent de consommer le méthane pour produire du CO . Si la richesse est encore plus grande, alors le méthane est en excès et la production de CO se stabilise. Ce

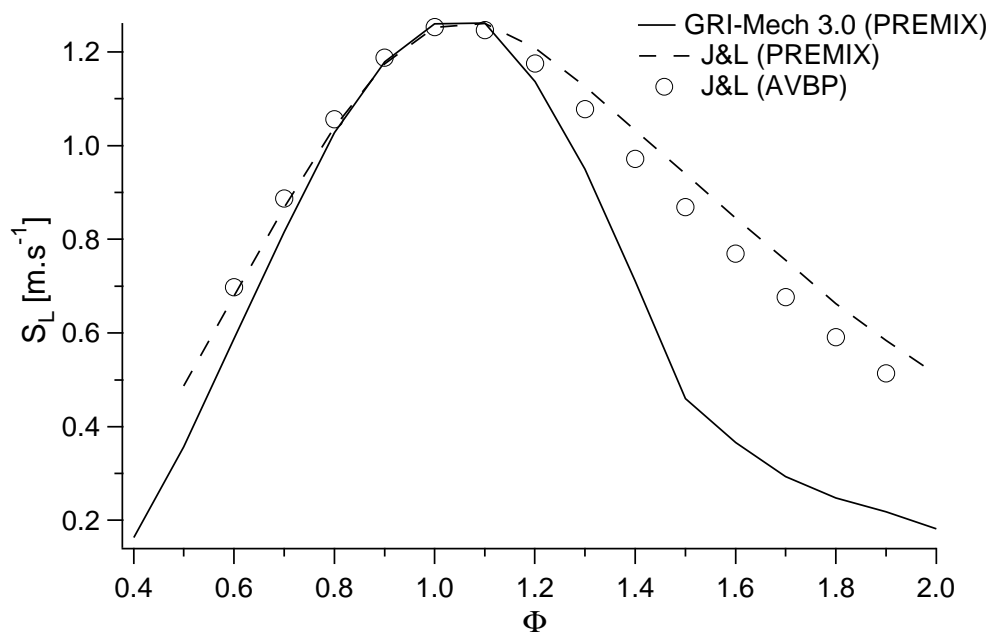


FIG. 3.10 – Vitesse laminaire de flamme (m/s) en fonction de la richesse. AVBP pour le schéma J&L ($p_1 = 2$ bar et $T_1 = 650$ K) est comparé à PREMIX pour le schéma J&L et le schéma détaillé GRI-Mech 3.0.

phénomène est bien reproduit par le schéma détaillé GRI-Mech 3.0. Avec le schéma J&L, le fuel en excès continue d'être consommé pour des richesses supérieures à 1.6 et donc la production de CO continue de croître. Comme la quantité de CO augmente, la réaction (IV) (Eq. (3.37)) est déplacée dans le sens direct et pour pallier au manque d' O_2 , la réaction (III) (Eq. (3.36)) est déplacée dans le sens de la dissociation de H_2O en H_2 , c'est pourquoi les erreurs entre ces deux espèces s'équilibrent.

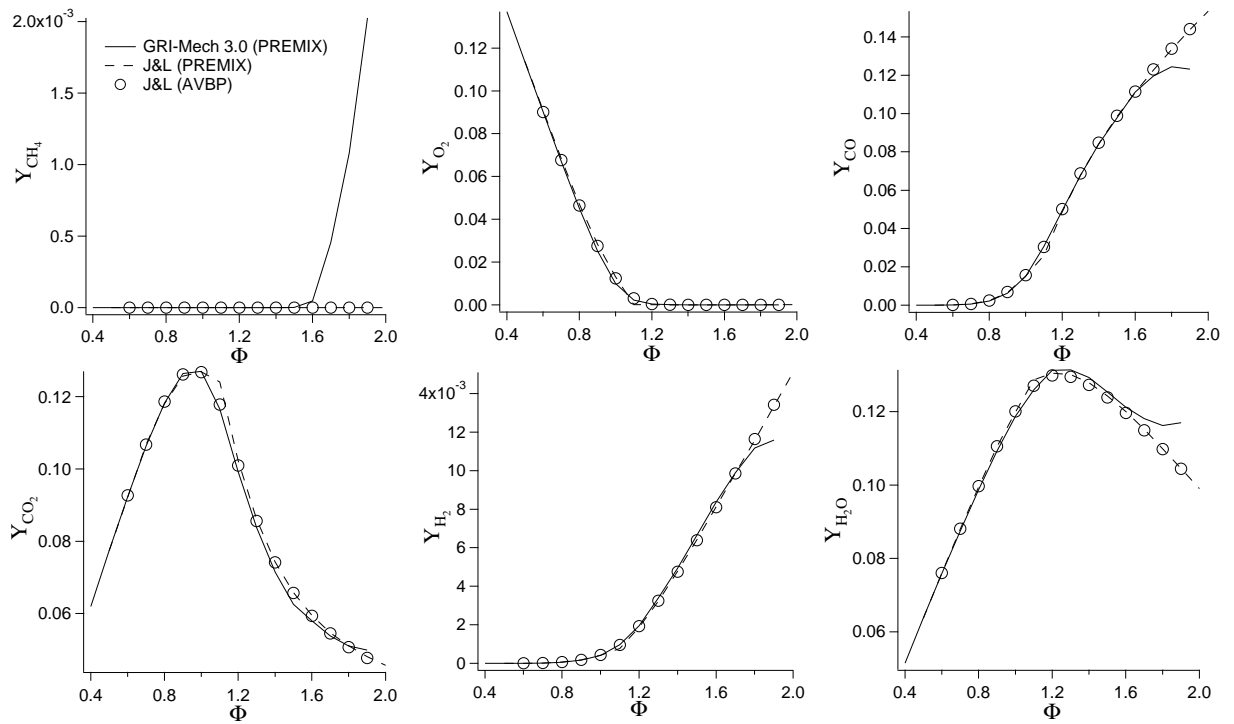


FIG. 3.11 – Fractions massiques des espèces en fin de combustion en fonction de la richesse. \circ : schéma J&L ($p_1 = 2$ bar et $T_1 = 650$ K) avec AVBP; pointillés: schéma J&L avec PREMIX, ligne pleine: GRI-Mech 3.0 avec PREMIX.

Chapitre 4

La LES réactive dans AVBP

4.1 La LES réactive dans AVBP

AVBP est un code parallèle développé au CERFACS. Il résout les équations de Navier-Stokes compressibles laminares et turbulentes en 2D et 3D sur des maillages structurés, non structurés ou hybrides. Pour des informations plus spécifiques, les articles [130,168] constituent une base de référence.

4.1.1 Généralités sur la LES

Simulation aux grandes échelles! filtre La sélection des échelles sur laquelle est basée la technique de simulation aux grandes échelles [57,102,163] est une séparation entre les grandes et les petites échelles. Pour ce faire, une échelle de coupure de référence doit être déterminée. Les échelles plus grandes que la longueur de coupure sont appelées les grandes échelles ou échelles résolues, tandis que les autres sont les petites échelles ou échelles de sous-maille. Le concept de LES est basée sur la théorie de la turbulence [161]. La statistique de la turbulence (distribution des fluctuations de vitesse dans un écoulement turbulent) a été quantifiée de façon élégante et rigoureuse par A.N. Kolmogorov [89,90]. Si une grande quantité d'études ont été menées dans le cas des écoulements réactifs, la modélisation de la combustion en LES est beaucoup plus récente [197]. Après un filtrage spatial noté $(\bar{\cdot})$, la variable f se décompose en une partie filtrée \bar{f} est une partie non résolue, appelée fluctuation de sous-maille f' . Pour simplifier la modélisation des termes filtrés dans le cas des équations de Navier-Stokes compressible, on utilise la moyenne de Favre $(\bar{\cdot})$. Dans ce cas, les variables sont pondérées par la masse volumique filtrée $\bar{\rho}$ de sorte que $f = \tilde{f} + f^{sgs}$, où $(\tilde{\cdot})$ et sgs désignent respectivement la quantité filtrée ($\tilde{f} = \bar{\rho}\bar{f}/\bar{\rho}$) et de sous-maille.

4.1.2 Les équations de la LES

Dans le code AVBP, l'opération de filtrage est réalisée implicitement par le maillage, puisque les structures plus petites que $2\Delta_x$ ne sont pas résolues par le calcul, mais prises en compte par le modèle LES. La dissipation et la dispersion du schéma numérique contribuent également à augmenter la taille du filtre. En outre, nous supposons que l'erreur générée par la commutation de l'opération de filtrage et de la dérivée partielle est négligeable par rapport à d'autres approximations telles que les modèles de sous-maille [112,196].

Le système d'équations à résoudre s'écrit sous la forme:

$$\frac{\partial \mathbf{w}}{\partial t} + \nabla \cdot \mathcal{F} = \mathbf{s} \quad (4.1)$$

où \mathbf{w} est le vecteur des variables conservatives (section 3.2), \mathcal{F} est le tenseur de flux et \mathbf{s} est le vecteur des termes sources. Après filtrage, l'Eq. (4.1) devient:

$$\frac{\partial \bar{\mathbf{w}}}{\partial t} + \nabla \cdot \bar{\mathcal{F}} = \bar{\mathbf{s}} \quad (4.2)$$

Chaque composante F_i ($i = 1,3$) du tenseur des flux filtré $\bar{\mathcal{F}}$ est la somme de trois contributions: le flux visqueux F_i^I , le flux non visqueux F_i^V et le flux de sous maille F_i^{sgs} : $F_i = F_i^I + F_i^V + F_i^{sgs}$.

Les termes non visqueux

Les trois composantes du tenseur de flux visqueux s'écrivent:

$$F_1^I = \begin{pmatrix} \overline{\rho \tilde{u}^2} + \bar{P} \\ \overline{\rho \tilde{u} \tilde{v}} \\ \overline{\rho \tilde{u} \tilde{w}} \\ (\overline{\rho \tilde{E}} + \bar{P}) \tilde{u} \\ \overline{\rho_k \tilde{u}} \end{pmatrix}, F_2^I = \begin{pmatrix} \overline{\rho \tilde{u} \tilde{v}} \\ \overline{\rho \tilde{v}^2} + \bar{P} \\ \overline{\rho \tilde{v} \tilde{w}} \\ (\overline{\rho \tilde{E}} + \bar{P}) \tilde{v} \\ \overline{\rho_k \tilde{v}} \end{pmatrix}, F_3^I = \begin{pmatrix} \overline{\rho \tilde{u} \tilde{w}} \\ \overline{\rho \tilde{v} \tilde{w}} \\ \overline{\rho \tilde{w}^2} + \bar{P} \\ (\overline{\rho \tilde{E}} + \bar{P}) \tilde{w} \\ \overline{\rho_k \tilde{w}} \end{pmatrix} \quad (4.3)$$

4.1.3 Les flux visqueux hors de la flamme

Les composantes du flux visqueux prennent la forme:

$$F_i^V = \begin{pmatrix} -\bar{\tau}_{i1} \\ -\bar{\tau}_{i2} \\ -\bar{\tau}_{i3} \\ -(\overline{\tilde{u} \tau_{i1}} + \overline{\tilde{v} \tau_{i2}} + \overline{\tilde{w} \tau_{i3}}) + \bar{q}_i \\ \bar{J}_{i,k} \end{pmatrix} \quad i = 1,3 \quad (4.4)$$

- Le tenseur des contraintes visqueuses filtré $\bar{\tau}_{ij}$ est associé au transport de la quantité de mouvement par diffusion moléculaire. L'hypothèse de faible non-linéarité des termes de diffusion visqueuse [198] permet d'écrire $\bar{\tau}_{ij} \approx \tilde{\tau}_{ij}$:

$$\bar{\tau}_{ij} \approx \tilde{\tau}_{ij} = 2\bar{\mu}(\tilde{S}_{ij} - \frac{1}{3}\delta_{ij}\tilde{S}_{ll}), \quad i,j = 1,3 \quad (4.5)$$

où S_{ij} est le tenseur des déformations :

$$\tilde{S}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} + \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} \right), \quad i,j = 1,3 \quad (4.6)$$

- Le flux diffusif $\tilde{J}_{i,k}$ correspond au transport de l'espèce k par diffusion moléculaire:

$$\bar{J}_{i,k} = \bar{\rho} \tilde{Y}_k \bar{V}_{i,k} \quad (4.7)$$

où $\bar{V}_{i,k}$ sont les composantes filtrées de la vitesse de diffusion \mathbf{V}_k de l'espèce k . Cette vitesse est souvent exprimée comme une fonction des gradients des espèces en utilisant l'approximation proposée par Hirschfelder [69]:

$$\tilde{X}_k \bar{V}_{i,k} = -D_k \frac{\partial}{\partial x_i} \tilde{X}_k \quad \text{pour } k = 1, N \quad (4.8)$$

\tilde{X}_k est la fraction molaire filtrée de l'espèce k et est relié à la fraction massique filtrée \tilde{Y}_k par la relation: $\tilde{X}_k = \tilde{Y}_k W / W_k$.

Pour assurer la conservation de la masse, une vitesse de correction doit être ajoutée:

$$\bar{V}_i^c = - \sum_{k=1}^N D_k \frac{W_k}{W} \frac{\partial \tilde{X}_k}{\partial x_i} \quad \text{pour } k = 1, N \quad (4.9)$$

Ainsi, le flux diffusif s'écrit:

$$\bar{J}_{i,k} = -\bar{\rho} \left(D_k \frac{W_k}{W} \frac{\partial \tilde{X}_k}{\partial x_i} - \tilde{Y}_k \bar{V}_i^c \right) \quad (4.10)$$

- Le flux de chaleur filtré est la somme de deux termes: un terme de flux conductif et un terme de flux de chaleur par la diffusion des espèces:

$$\bar{\mathbf{q}} = -\frac{\mu C_p}{Pr} \nabla \tilde{T} + \sum_{k=1}^N \bar{\mathbf{J}}_k \tilde{h}_{s,k} \quad (4.11)$$

Les termes de sous-maille

Les composantes du flux de sous-maille prennent la forme:

$$F_i^{sgs} = \begin{pmatrix} -\tau_{i1}^{sgs} \\ -\tau_{i2}^{sgs} \\ -\tau_{i3}^{sgs} \\ -(\tilde{u}\tau_{i1}^{sgs} + \tilde{v}\tau_{i2}^{sgs} + \tilde{w}\tau_{i3}^{sgs}) + q_i^{sgs} \\ J_{i,k}^{sgs} \end{pmatrix} \quad i = 1, 3 \quad (4.12)$$

Le filtrage LES fait apparaître des corrélations d'ordre deux qu'il faut modéliser pour clore le système:

- Le tenseur de Reynolds :

$$\tau_{ij}^{sgs} = -\bar{\rho} (\widetilde{u_i u_j} - \tilde{u}_i \tilde{u}_j) \quad (4.13)$$

- Le flux diffusif des espèces en sous-maille:

$$J_k^{sgs} = \bar{\rho}(u_i \widetilde{Y}_k - \widetilde{u}_i \widetilde{Y}_k) \quad (4.14)$$

- Le flux de chaleur en sous-maille:

$$q^{sgs} = \bar{\rho}(\widetilde{u}_i \widetilde{e}_s - \widetilde{u}_i \widetilde{e}_s) \quad (4.15)$$

4.1.4 Fermeture des flux diffusifs

Le tenseur de Reynolds

Ces termes de sous-maille décrivent les interactions entre les échelles résolues et non résolues de la turbulence. L'influence des échelles de sous-maille sur les structures résolues est prise en compte par l'introduction d'une viscosité turbulente ν_t . Le concept de viscosité turbulente, introduit par Boussinesq, permet de relier la partie anisotrope du tenseur des contraintes de Reynolds τ_{ij}^{sgs} au tenseur résolu des vitesses de déformation S_{ij} :

$$\tau_{ij}^{sgs} - \frac{1}{3} \delta_{ij} \tau_{kk}^{sgs} = 2\bar{\rho} \nu_t (\widetilde{S}_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} \widetilde{S}_{ll}) \quad (4.16)$$

La fermeture consiste à modéliser la viscosité turbulente ν_t .

Le modèle de Smagorinsky

Dans le modèle de Smagorinsky [176], ν_t s'écrit sous la forme d'une relation algébrique:

$$\nu_t = (C_s \Delta)^2 \sqrt{2 \widetilde{S}_{ij} \widetilde{S}_{ij}}, \quad (4.17)$$

C_s est la constante de Smagorinsky $C_s = 0.18$ et Δ est la taille caractéristique du filtre LES (pour les maillages isotropes, Δ correspond à la taille de cellule). Ce modèle apporte une bonne estimation de la dissipation de l'énergie cinétique dans les écoulements turbulents homogènes et isotropes. Néanmoins, il s'avère souvent trop dissipatif dans les écoulements cisailés et dans les régions de transition vers la turbulence.

Le modèle de Smagorinsky filtré

Les fluctuations des grandes échelles sont filtrées à l'aide d'un filtre passe-haut (HP), défini à partir d'une dérivée du quatrième ordre. La viscosité turbulente s'écrit:

$$\nu_t = (C_{SF} \Delta)^2 \sqrt{2 HP(\widetilde{S}_{ij}) HP(\widetilde{S}_{ij})}, \quad (4.18)$$

avec

$$HP(\tilde{S}_{ij}) = \frac{\partial HP(u_j)}{\partial x_i} + \frac{\partial HP(u_i)}{\partial x_j} \quad (4.19)$$

$C_{S_F} = 0.37$ est la constante du modèle et $HP(\tilde{S}_{ij})$ est le tenseur des déformations obtenus à partir des vitesses résolues filtrés par un filtre passe-haut. Ce modèle a été développé pour mieux représenter les phénomènes liés à la transition vers la turbulence [49]. Ainsi, contrairement au modèle de Smagorinsky ν_t est nul dans les écoulements cisailés laminaires.

Le modèle WALE

Le modèle WALE [50,133] permet d'obtenir une décroissance de ν_t en suivant asymptotiquement une loi en $(y^+)^3$, où y^+ est la distance normalisée à la paroi:

$$\nu_t = (C_w \Delta)^2 \frac{(s_{ij}^d s_{ij}^d)^{3/2}}{(\tilde{S}_{ij} \tilde{S}_{ij})^{5/2} + (s_{ij}^d s_{ij}^d)^{5/4}}, \quad (4.20)$$

où le tenseur s_{ij}^d est défini par:

$$s_{ij}^d = \frac{1}{2}(\tilde{g}_{ij}^2 + \tilde{g}_{ji}^2) - \frac{1}{3} \tilde{g}_{kk}^2 \delta_{ij} \quad (4.21)$$

avec $\tilde{g}_{ij}^2 = \tilde{g}_{ik} \tilde{g}_{kj}$ et $\tilde{g}_{ij} = \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j}$. La constant C_w vaut environ 0.5. Par rapport à la formulation classique de Smagorinsky, ce modèle présente les avantages suivants:

- L'opérateur spatial prend en compte localement les taux d'étirement et de rotation. Ainsi, toutes les structures tourbillonnaires participant à la dissipation de l'énergie cinétique sont détectées par le modèle.
- La viscosité turbulente décroît naturellement vers zéro en proche paroi .
- Le modèle impose $\nu_t = 0$ dans les écoulements cisailés, ainsi la transition vers la turbulence peut être reproduite en laissant croître les modes linéairement instables.

Modélisation des flux des espèces et de chaleur en sous-maille

Par analogie avec le tenseur des contraintes de Reynolds, le transport des espèces en sous-maille est modélisé par:

$$\tilde{J}_k^{sgs} = - \left(\frac{\mu_t}{S_{c,k}^t} \frac{W_k}{\bar{W}} \nabla \tilde{X}_k + \bar{\rho}_k V^{c,sgs} \right) \quad (4.22)$$

with

$$V^{c,sgs} = - \sum_{k=1}^N \frac{\mu_t}{\bar{\rho} S_{c,k}^t} \frac{W_k}{\bar{W}} \nabla \tilde{X}_k \quad (4.23)$$

et la diffusion de chaleur est modélisée par:

$$q^{sgs} = \frac{\gamma}{Pr} \mu_t \nabla (\tilde{E} - \tilde{u}_i^2) \quad (4.24)$$

Comme pour les flux visqueux (Section 3.2.3), les nombres de Schmidt et de Prandtl turbulents sont supposés constants. En outre, les nombres de Schmidt turbulents sont supposés égaux pour toutes les espèces: $P_r^t = 0.9$ et $S_{c,k}^t = 0.9$.

4.1.5 les flux visqueux dans un écoulement réactif

Les équations de l'énergie et des espèces sont modifiées dans un écoulement réactif pour satisfaire les conditions suivantes:

A1 Dans les zones laminaires, les équations doivent propager la flamme à la vitesse laminaire de flamme S_L^0 .

A2 Dans les zones de prémélange turbulent, elles doivent propager la flamme avec une vitesse de consommation S_T contrôlée par la turbulence dans les gaz frais.

A3 Près des murs, la vitesse de flamme doit tendre vers zéro pour éviter la propagation du front le long des parois (une propriété souvent difficile à respecter dans les modèles).

Ces critères sont satisfaits avec le modèle de flamme épaissie (TF-LES) décrit dans la section 2.2.2.

Ainsi le flux diffusif des espèces $\bar{\mathbf{J}}_k$ est remplacé par $EF\bar{\mathbf{J}}_k$, et le flux de chaleur $\bar{\mathbf{q}}$ devient $EF\bar{\mathbf{q}}$.

Le terme source filtré de l'Eq. 4.1 devient:

$$\mathbf{s} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \frac{E\bar{\omega}_T}{F} \\ \frac{-E\bar{\omega}_k}{F} \end{pmatrix}$$

Par exemple, si on considère l'équation de conservation de l'espèce k dans un écoulement réactif laminaire:

$$\frac{\partial(\rho Y_k)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i Y_k) = \frac{\partial}{\partial x_i} J_i^k + \dot{\omega}_k \quad \text{pour } k = 1, N \quad (4.25)$$

L'Eq. 4.25 est une équation sans modèle de turbulence que l'on peut résoudre par une DNS. Si on multiplie la diffusivité moléculaire par F et que l'on divise le taux de réaction par F , on obtient une flamme épaissie F fois. L'Eq. (4.25) devient:

$$\frac{\partial(\rho Y_k)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i Y_k) = \frac{\partial}{\partial x_i} F J_i^k + \frac{1}{F} \dot{\omega}_k \quad \text{pour } k = 1, N \quad (4.26)$$

Pour compenser la diminution de surface (voir section 2.2.2) et satisfaire les propriétés A1 à A3, la fonction efficacité E est introduite:

$$\frac{\partial(\rho Y_k)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i Y_k) = \frac{\partial}{\partial x_i} EF J_i^k + \frac{E}{F} \dot{\omega}_k \quad \text{pour } k = 1, N \quad (4.27)$$

Dans un écoulement réactif turbulent en LES, l'Eq. (4.27) après application du filtre LES s'écrit:

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{Y}_k)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\bar{\rho}\tilde{u}_i\tilde{Y}_k) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(EF\bar{J}_i^k + J_{i,k}^{sgs} \right) + \frac{E}{F}\bar{\omega}_k \quad k = 1, N \quad (4.28)$$

Le terme source $\bar{\omega}_k$ est exprimé à partir des grandeurs résolues en LES: $\bar{\omega}_k = \omega_k(\tilde{Y}_k, \tilde{T})$.

Il est facile de vérifier que l'Eq. 4.28 vérifie les propriétés A1 à A3:

A1 Dans les zones laminaires, la fonction d'efficacité E vaut l'unité par construction. Le terme de diffusion \bar{J}_k est multiplié par le facteur d'épaississement F , tandis que le taux de réaction est divisé par ce même facteur. Comme il a été expliqué dans la section 2.2.2, le front de flamme doit se propager à la même vitesse que dans l'Eq. (4.25) mais le front est F fois plus large que celui obtenu avec l'Eq. (4.25).

A2 Dans les zones de prémélange turbulent, la fonction d'efficacité E est déterminée pour que la vitesse de propagation du front soit égale à la vitesse turbulente de flamme $ES_L^0 = S_T$.

A3 Près des parois, la dépendance en température du taux de réaction (de par la loi d'Arrhénius) permet au terme source de tendre vers zéro. Cela ne signifie pas que la distance minimale entre la flamme et le mur est correcte [150,153], mais le comportement de la flamme reste physique, sans avoir recours à des astuces numériques pour imposer un taux de réaction nul aux murs.

4.1.6 Le modèle de flamme épaissie dynamiquement DTF-LES

L'idée fondamentale de ce modèle est qu'il dégénère naturellement vers les trois cas extrêmes de topologies de flammes:

- (1) la flamme parfaitement prémélangée,
- (2) la flamme de diffusion,
- (3) le mélange sans combustion.

Le modèle DTF-LES est formulé à partir du modèle de flamme épaissie TF-LES (section 2.2.2) modifié pour vérifier aussi les conditions (2) et (3).

L'Eq. (4.28) est adaptée à la combustion turbulente parfaitement prémélangée. Dans le cas d'un prémélange partiel, des conditions supplémentaires sont exigées:

A4 Loin du front de flamme, dans les zones où les réactifs se mélangent, l'Eq. (4.28) doit concorder avec l'équation filtrée classique d'un scalaire passif. Dans ces zones, il faut assurer que $F = 1$.

A5 Pour les flammes de diffusion, le dégagement de chaleur total doit être identique à celui de la flamme non épaissie.

Les critères A4 et A5 sont satisfaits grâce à une formulation étendue du modèle TF, appelée modèle de flamme épaissie dynamiquement ou (DTF pour *dynamically thickened flame* [100]).

Le facteur d'épaississement n'est plus une constante mais une variable qui tend vers F_{max} dans la flamme et vers l'unité en dehors de la flamme:

$$F = 1 + (F_{max} - 1)\theta \quad (4.29)$$

où θ est un senseur qui dépend de la température et des fractions massiques:

$$\theta = \tanh\left(C_F \frac{\Omega}{\Omega_0}\right) \quad (4.30)$$

Ω est une fonction qui détecte la présence de la zone de réaction, Ω_0 est le maximum de Ω pour une flamme laminaire 1D stoechiométrique et C_F est un coefficient du modèle. Ω est calculée à partir des paramètres cinétiques du taux de consommation du fuel:

$$\Omega = Y_F^{\nu'_F} Y_O^{\nu'_O} \exp\left(-\Lambda \frac{E_a}{RT}\right) \quad (4.31)$$

Λ permet de déclencher l'épaississement avant la réaction afin d'obtenir une fonction d'épaississement plus large que la flamme, c'est pourquoi $\Lambda < 1$ (généralement $\Lambda = 0.5$). Le senseur θ varie entre 0 en dehors de la flamme et 1 dans la flamme.

Nouvelle fermeture des termes de sous-maille dans un écoulement réactif

Lorsque le modèle DTF-LES est appliqué, l'équation des espèces (4.28) s'écrit:

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{Y}_k)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\bar{\rho}\tilde{u}_i\tilde{Y}_k) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(EF\bar{J}_i^k + (1 - \theta)J_{i,k}^{sgs} \right) + \frac{E}{F}\bar{\omega}_k \quad k = 1, N \quad (4.32)$$

– Les Eqs. 4.29 et 4.30 garantissent que la condition A4 soit satisfaite. Loin du front de flamme, le senseur θ est petit et F tend vers 1, de sorte que l'Eq. 4.33 devient:

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{Y}_k)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\bar{\rho}\tilde{u}_i\tilde{Y}_k) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\bar{J}_i^k + J_{i,k}^{sgs} \right) \quad k = 1, N \quad (4.33)$$

qui représente l'équation standard de conservation des espèces en LES dans un écoulement non réactif.

– La condition A5 est la plus difficile à satisfaire: Dans une flamme de diffusion le flux des espèces vers les zones réactives doit être semblable pour la flamme épaissie et pour la flamme non épaissie, afin de conserver le taux de consommation total. Des tests réalisés avec le code de Sandia OPP-DIFF [9] ont montré que souvent, les zones de diffusion et réaction sont difficiles à séparer, et que par conséquent la condition A5 n'est satisfaite que partiellement (typiquement le taux de consommation est prédit avec une erreur de 30%).

Finalement, l'Eq. (4.33) est une généralisation du modèle TF-LES qui prend parfaitement en compte les cas limites de prémélange parfait et de flammes partiellement prémélangées, et qui retrouve partiellement la limite des flammes de diffusion.

En pratique, le choix de F_{max} dépend surtout du maillage. En effet, la valeur choisie doit permettre de résoudre le front de flamme sur le maillage LES. Sa valeur doit être la plus petite possible pour limiter la zone sur laquelle le modèle de combustion turbulente intervient. Finalement, si n est le nombre de cellules nécessaires dans le front de flamme (typiquement 6 cellules), alors F_{max} peut être estimé par la relation:

$$F = \frac{n\Delta_x}{\delta_L^0} \quad (4.34)$$

Dans un maillage non structuré (composé par exemple de tétraèdres), la taille des mailles peut-être variable. Ainsi, il est possible de raffiner localement le maillage, par exemple dans les zones de cisaillement, en sortie des injecteurs ou dans les zones réactives. Pour cette raison, un épaissement adapté à la taille de la cellule a été formulé par P. Schmitt au CERFACS. La valeur de F_{max} n'est plus une constante fixée par l'utilisateur, mais elle est calculée en chaque noeud i et dépend de la taille caractéristique de la cellule au noeud. ainsi:

$$F_{max}(i) = \frac{n\Delta_i}{\delta_L^0} \quad (4.35)$$

4.1.7 Extension du modèle DTF à un schéma cinétique réduit multi-étapes: DTF_MS

Estimation de Ω

Lorsque la combustion est modélisée par un schéma cinétique comportant plusieurs réactions, l'utilisation d'un senseur basé uniquement sur la consommation du fuel, pour construire la fonction épaissement, n'est plus adapté. En effet, certaines réactions ont lieu derrière le front de flamme, comme expliqué dans la section 3.5. Pour être correctement résolues, ces réactions ont aussi besoin d'être épaissies. Il paraît donc logique de construire une fonction basée sur les termes sources de toutes les espèces $\dot{\omega}_k$. Ces termes sources sont calculés comme dans l'Eq. (3.10), sauf que l'énergie d'activation est multipliée par Λ avec $0 < \Lambda < 1$ afin d'obtenir une fonction d'épaissement plus large que la flamme:

$$\Omega = \max_{k=1,N} (|\dot{\omega}_k(Y_k, T/\Lambda)|) \quad (4.36)$$

Ensuite la formulation du senseur θ est la même que dans l'Eq. (4.30). La valeur de Ω_0 est obtenue en calculant le maximum de Ω pour une flamme 1D à la stœchiométrie.

Validation avec des flammes 1D de méthane/air et le schéma J&L

Le modèle est tout d’abord validé en calculant une flamme 1D de méthane/air. Le schéma cinétique J&L, présenté dans la section 3.5 est utilisé pour les simulations. Les paramètres du modèles DTF_MS sont fixés pour toutes ces simulations (tableau 4.1). Les Figs. 4.1 à 4.6 montrent les résultats des calculs de flammes à trois richesses différentes ($\Phi = 1, 0.6$ et 1.4) et avec un épaissement $F_{max} = 2$. Les Figs. 4.1, 4.2 et 4.3 représentent les taux de production des espèces

Λ	C_F	Ω_0 (kg.m ⁻³ .s ⁻¹)
0.75	10	27042

TAB. 4.1 – Valeurs des coefficients du modèle DTF_MS associé avec le schéma cinétique J&L pour le calcul de flammes épaissies de méthane/air.

et le facteur d’épaississement θ . On constate que l’épaississement couvre bien la zone réactive délimitée par les taux de production des espèces. Cette zone est caractérisée par la présence de forts gradients des termes sources. Le facteur de Légier utilisé dans le modèle DTF (section 4.1.6) n’encadre pas correctement cette zone de forts gradients. De plus, on vérifie que le senseur $\theta = 1$ dans la flamme et $\theta = 0$ en dehors de la flamme. Les Figs. 4.4, 4.5 et 4.6 montrent les profils épaissis des espèces, de la température et du taux de dégagement de chaleur ($HR = \dot{\omega}_T$). Les grandeurs à conserver sont la température de fin de combustion (T_{ad}) et la vitesse de flamme (S_L). Le Tableau 4.2 récapitule les valeurs de T_{ad} , S_L et des fractions massiques dans les gaz brûlés pour les flammes épaissies et non épaissies.

Si on compare les profils des espèces dans une flamme épaissie dynamiquement (avec le modèle DTF_MS) et non épaissie (Fig. 4.7), on constate que la composition des gaz brûlés est conservée, ainsi que la valeur des maxima des fractions massiques. En revanche, la quantité totale produite (intégrée sur le domaine) est modifiée. Les erreurs relatives en terme de masse totale produite sont présentées sur le Tableau 4.3. On constate que l’erreur ne dépasse pas 13 %, excepté pour CO à la richesse $\Phi = 0.6$, mais dans ce cas la quantité de CO produite est très faible (voir Tableau 4.2 et Fig. 3.11).

4.2 Les schéma numériques

Les schémas numériques utilisés dans ces travaux de thèse pour résoudre les équations de Navier-Stokes sont:

Richesse	Épaississement	$S_L(m/s)$	T_{ad} (K)	Y_{CO}	Y_{H_2}	Y_{CO_2}	Y_{H_2O}
$\Phi = 0.6$	non épaissie	0.698	1947	$1.24 \cdot 10^{-4}$	$4.08 \cdot 10^{-6}$	$9.269 \cdot 10^{-2}$	$7.606 \cdot 10^{-2}$
	$F_{max} = 2$	0.70	1947	$1.24 \cdot 10^{-4}$	$4.08 \cdot 10^{-6}$	$9.269 \cdot 10^{-2}$	$7.606 \cdot 10^{-2}$
$\Phi = 1.0$	non épaissie	1.253	2452	$1.565 \cdot 10^{-2}$	$4.334 \cdot 10^{-4}$	0.1268	0.1201
	$F_{max} = 2$	1.26	2452	$1.565 \cdot 10^{-2}$	$4.335 \cdot 10^{-4}$	0.1268	0.1201
$\Phi = 1.4$	non épaissie	0.972	2240	$8.48 \cdot 10^{-2}$	$4.758 \cdot 10^{-3}$	$7.415 \cdot 10^{-2}$	0.1273
	$F_{max} = 2$	0.975	2240	$8.48 \cdot 10^{-2}$	$4.76 \cdot 10^{-3}$	$7.414 \cdot 10^{-2}$	0.1273

TAB. 4.2 – Valeurs de la température en fin de combustion, de la vitesse de flamme et des fractions massiques des produits de combustion obtenus après un calcul de flamme laminaire prémélangée 1D, épaissie dynamiquement et non épaissie. La flamme a été calculée à trois richesses différentes avec le schéma J&L (650 K et 2 bar) dans AVBP.

- TTGC [33]: c’est un schéma de type élément fini centré, d’ordre trois en temps et en espace (schéma de type Taylor-Galerkin à deux étapes), peu dissipatif et peu dispersif, il a été spécialement développé et implanté dans AVBP pour les calculs LES.
- Lax-Wendrof: c’est un schéma de type Volumes Finis centré en espace, avec une intégration temporelle de type Runge-Kutta à une seule étape. Ce schéma présente l’avantage d’être peu coûteux en terme de cout CPU, mais il plus dissipatif et dispersif que TTGC. Pour cette raison, il est souvent adopté pour démarrer un calcul.

4.3 Les conditions aux limites

Les conditions aux limites sont un élément essentiel des simulations. Il est maintenant reconnu que les ondes acoustiques peuvent avoir un rôle essentiel dans la dynamique des flammes en milieu confiné. La possibilité de mesurer les impédances des installations expérimentales et de les imposer dans les simulations se révèle souvent nécessaire en LES. Ceci est possible lorsque les conditions aux limites sont déterminées par une méthode basée sur l’analyse des ondes (acoustiques et entropiques) traversant les frontières du domaines. Dans AVBP, l’approche caractéristique des conditions aux limites est traitée par la méthode NSCBC [8,151]. Cette méthode permet de rendre les entrées et sorties du domaine, partiellement ou non réfléchissantes.

Richesse Φ	Erreur relative (en %)			
	CO	H_2	CO_2	H_2O
0.6	+52	+12.7	-4.4	+0.4
1.0	+12	+6.6	-1.6	+1
1.4	+1.7	+3	-2.7	+0.5

TAB. 4.3 – Erreur relative (en %) de la masse des espèces produites dans une flamme 1D stœchiométrique épaissie 2 fois (épaissement dynamiquement DTF_MS avec $F_{max} = 2$) par rapport à une flamme non épaissie. La flamme a été calculée à trois richesses différentes avec le schéma J&L (650 K et 2 bar) dans AVBP.

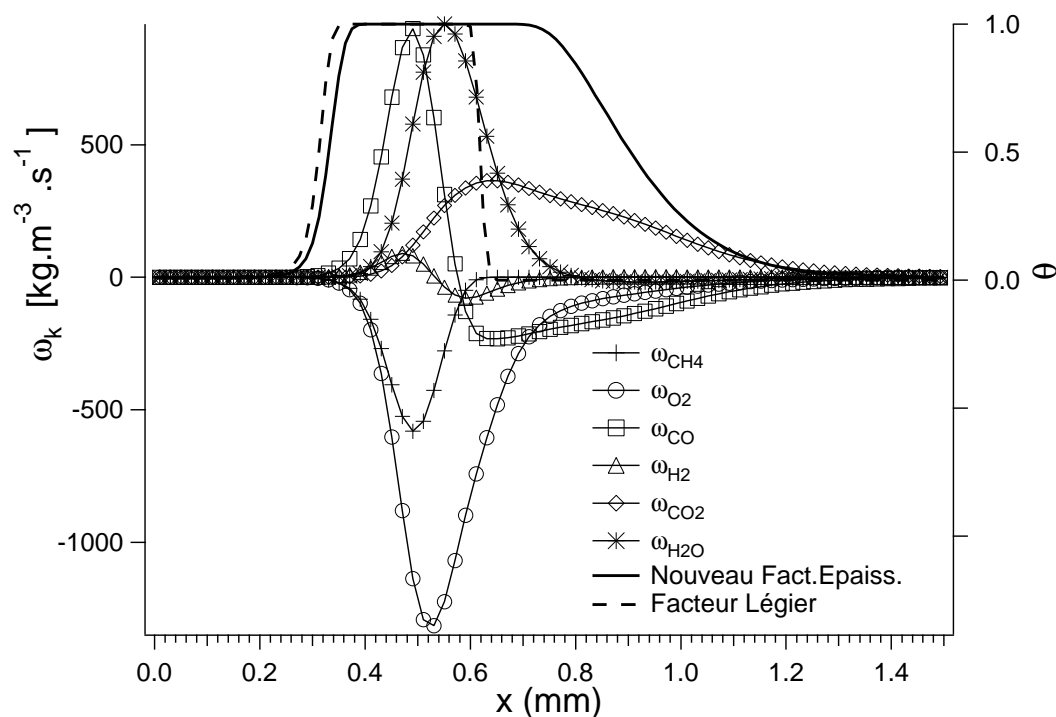


FIG. 4.1 – Termes sources et facteur d'épaissement θ d'une flamme 1D de méthane/air (650 K et 2 bar) à $\Phi = 1.0$ obtenus avec le schéma J&L. En pointillé: Facteur d'épaissement de Légier [100,99] (DTF) et en gras: Nouveau facteur (DTF_MS).

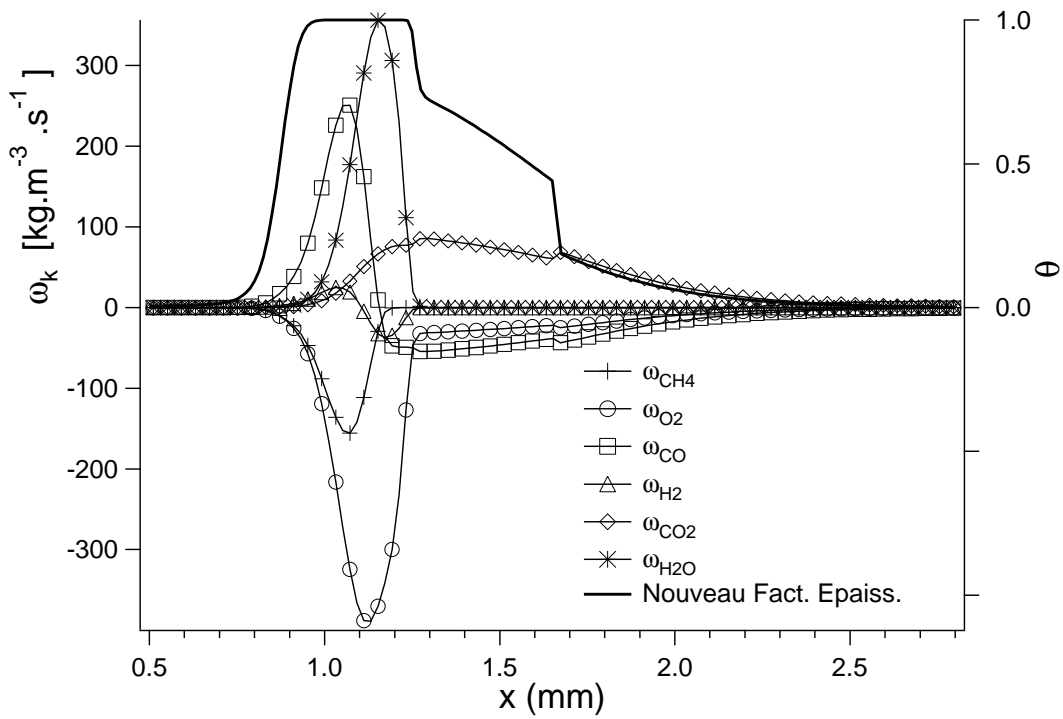


FIG. 4.2 – Termes sources et facteur d'épaissement θ d'une flamme 1D de méthane/air (650 K et 2 bar) à $\Phi = 0.6$ obtenus avec le schéma J&L et l'épaissement dynamique DTF_MS ($F_{max} = 2$).

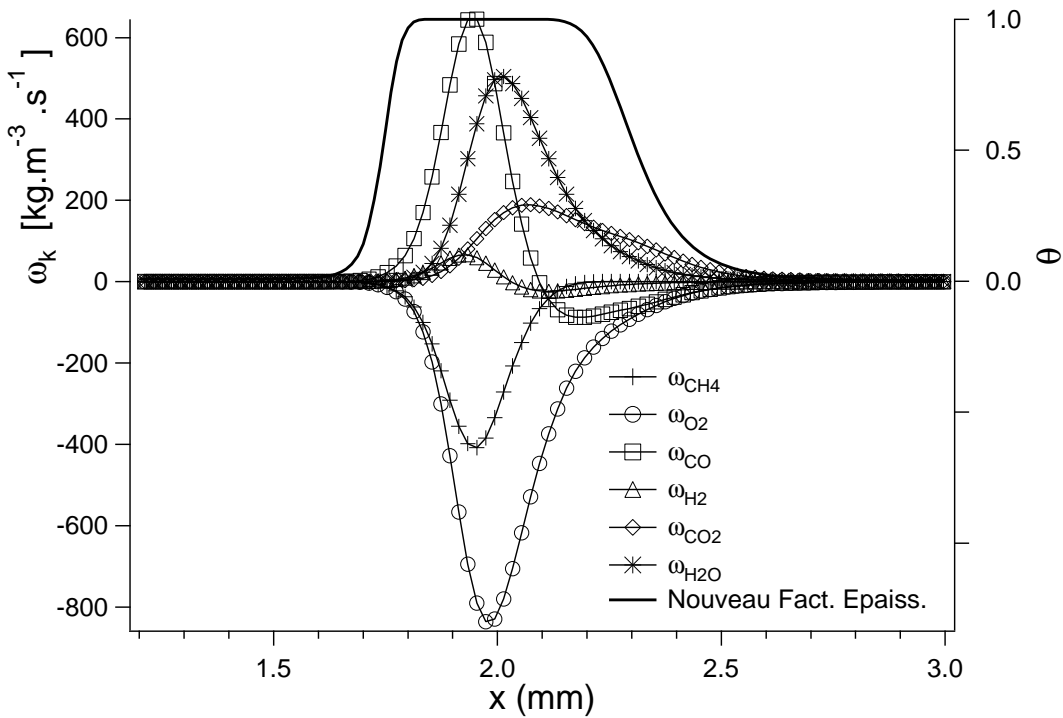


FIG. 4.3 – Termes sources et facteur d'épaissement θ d'une flamme 1D de méthane/air (650 K et 2 bar) à $\Phi = 1.4$ obtenus avec le schéma J&L et l'épaissement dynamique DTF_MS ($F_{max} = 2$).

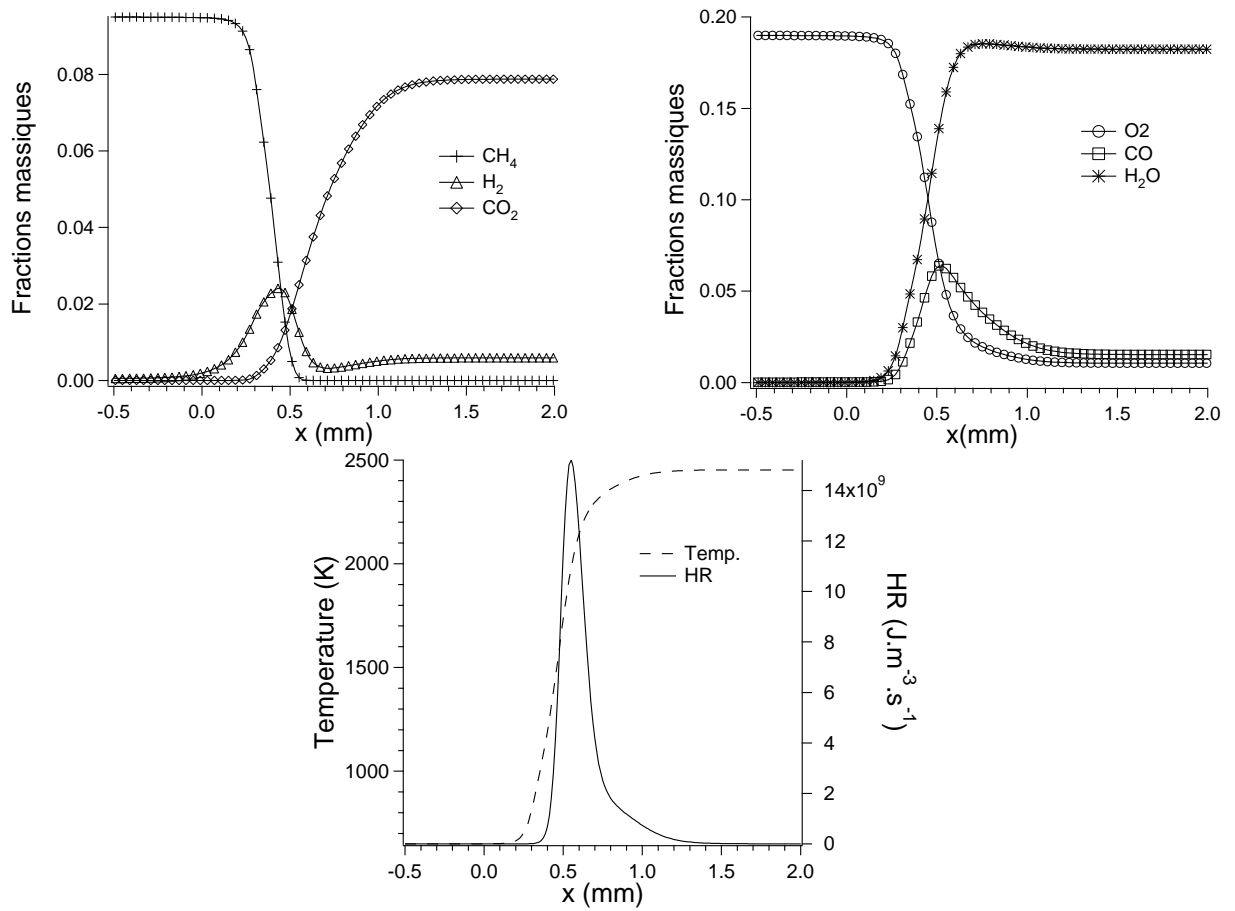


FIG. 4.4 – Flamme 1D de méthane/air (650 K et 2 bar) à $\Phi = 1.0$ obtenue avec le schéma J&L et avec l'épaississement dynamique DTF_MS ($F_{max} = 2$).

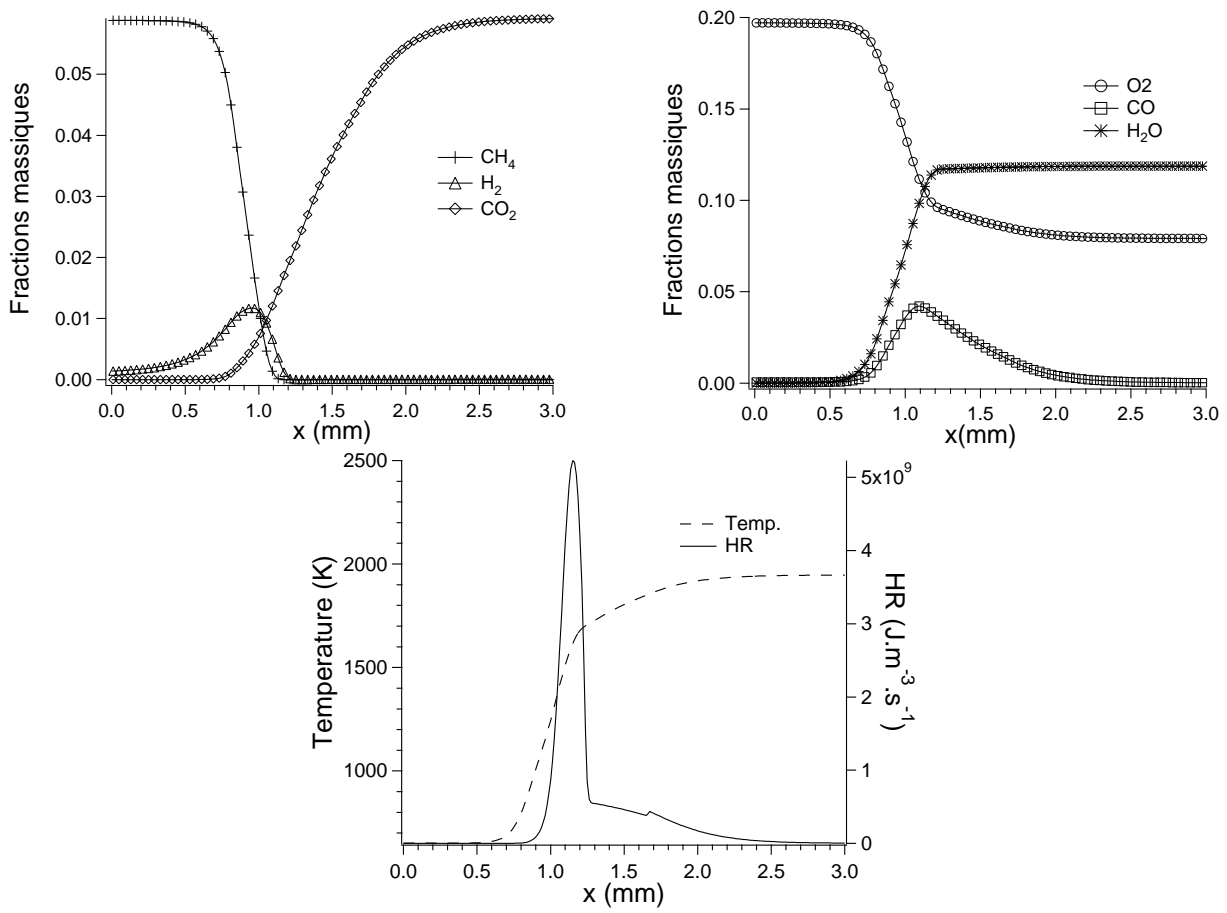


FIG. 4.5 – Flamme 1D de méthane/air (650 K et 2 bar) à $\Phi = 0.6$ obtenue avec le schéma J&L et avec l'épaississement dynamique DTF_MS ($F_{max} = 2$).

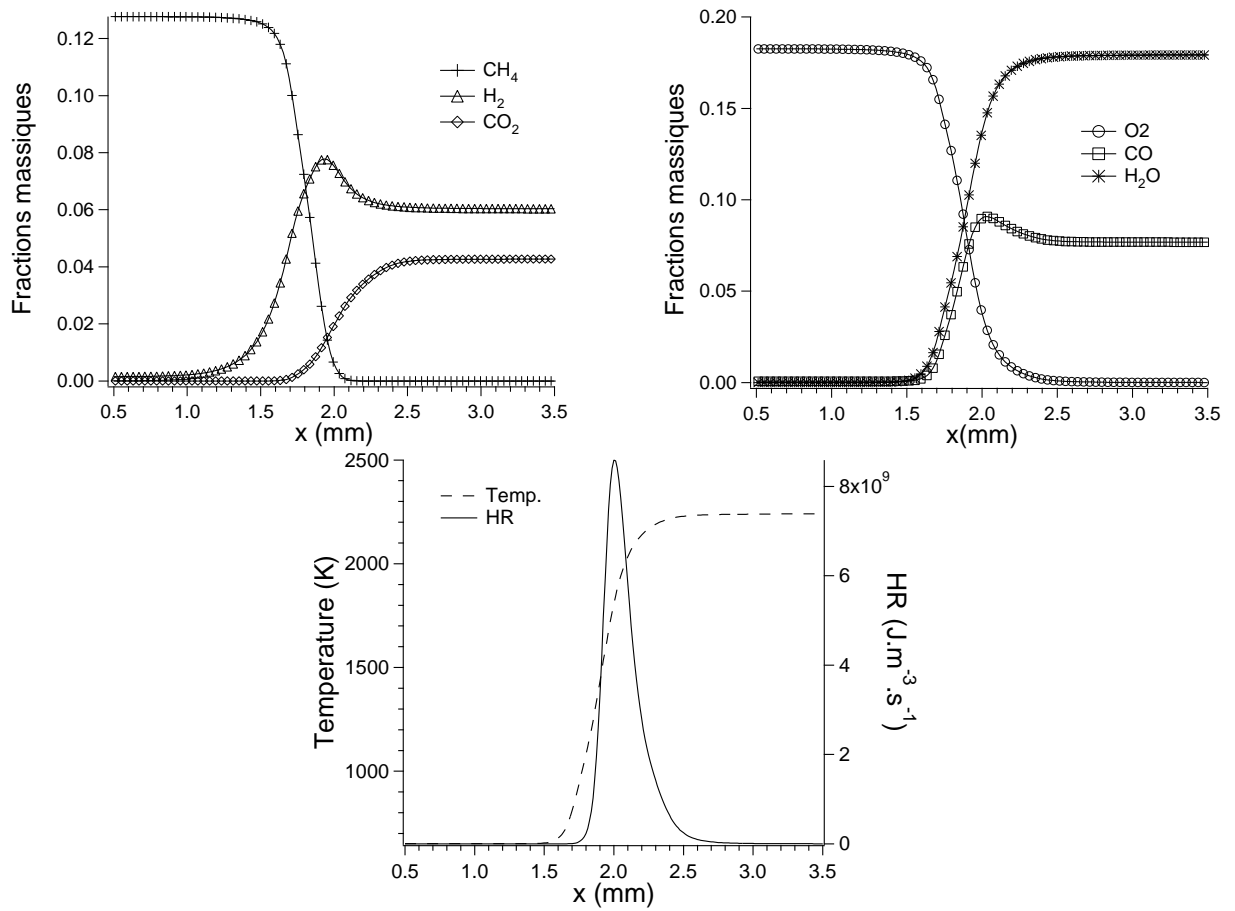


FIG. 4.6 – Flamme 1D de méthane/air (650 K et 2 bar) à $\Phi = 1.4$ obtenue avec le schéma J&L et avec l'épaisseur dynamique DTF_MS ($F_{max} = 2$).

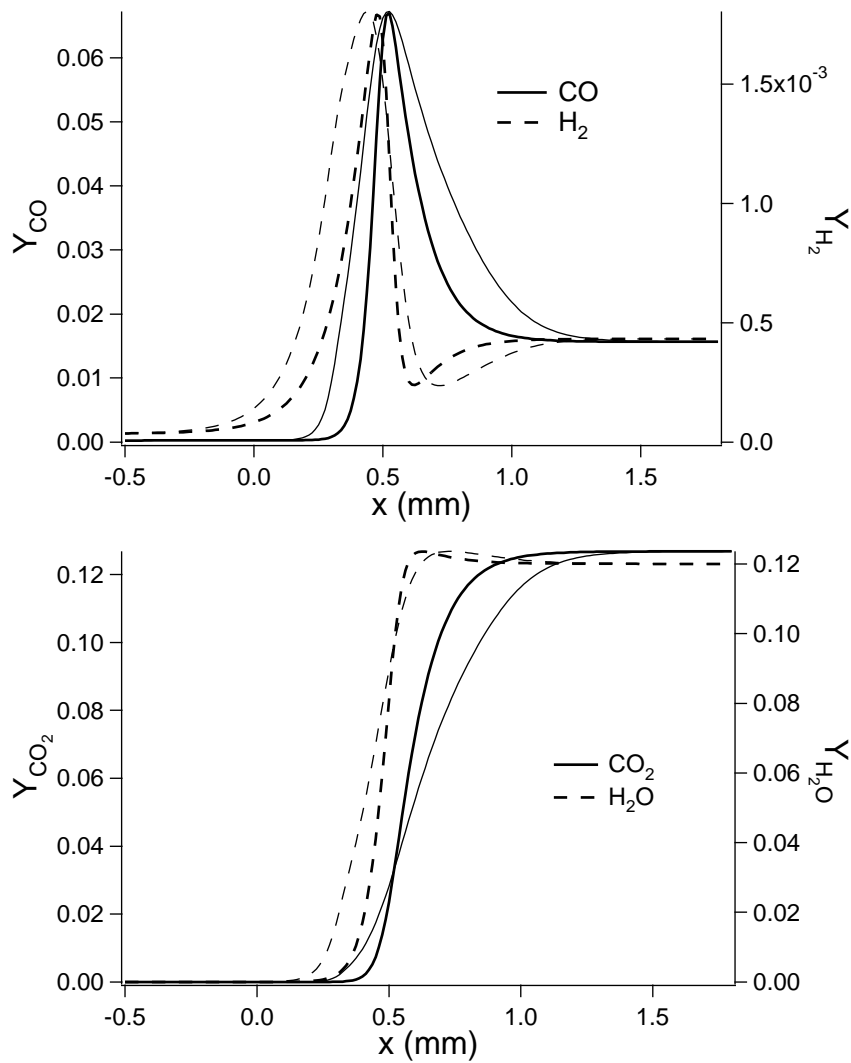


FIG. 4.7 – Profils des fractions massiques des produits de combustion dans une flamme 1D stœchiométrique obtenue avec le schéma J&L (650 K et 2 bar). Trait gras: flamme non épaissie; trait fin: épaississement dynamique DTF_MS avec $F_{max} = 2$.

Deuxième partie

Les méthodes de mesure des réponses
d'écoulement à des excitations
acoustiques par la LES

Cette partie est constituée d'un article destiné à la publication dans *Combustion & Flame* [189] et est rédigée en anglais.

La prédiction et le contrôle des instabilités de combustion requièrent l'identification de la réponse de la chambre de combustion. L'identification consiste généralement à imposer une excitation acoustique dans la chambre (par exemple en modulant la vitesse d'entrée) et à mesurer sa réponse. Deux méthodes sont régulièrement rencontrées dans la littérature pour analyser cette réponse: l'identification des matrices de transfert (ITM) et les fonctions de transfert (FTF). Dans les approches ITM, le brûleur est considéré comme une boîte noire et une formulation à "deux ports" (basée sur les perturbations acoustiques de la pression et de la vitesse) est utilisée pour construire la matrice de transfert reliant les fluctuations acoustiques de part et d'autre du brûleur. Un inconvénient de cette méthode est que dans les expériences, la mesure des signaux de pression dans les gaz brûlés est difficile et bien souvent les signaux sont très bruités. Dans les approches FTF, les mesures de pression sont remplacées par les mesures du taux de dégagement de chaleur global (à l'aide de méthodes optiques). Les fluctuations du taux de réaction sont alors reliées aux fluctuations de la vitesse mesurées en un point de référence (en général, l'entrée du brûleur) par la fonction de transfert. Les deux méthodes ITM et FTF peuvent être utilisées expérimentalement ou numériquement, et le calcul numérique permet de comparer les deux concepts: cette étude s'appuie sur la simulation numérique compressible d'une flamme laminaire de type Bunsen sous excitation acoustique pour analyser les deux méthodes. Les résultats montrent que les approches FTF conduisent à un problème mal défini dès lors que le point de référence n'est pas assez proche de la flamme. Cette limite liée à la "compacité" est quantifiée en terme de distance entre le point de référence et la flamme. Le problème vient du fait que les approches FTF ne prennent en compte que les oscillations de vitesse. Des méthodes FTF étendues sont proposés, qui prennent en compte à la fois les fluctuations de vitesse et de pression au point de référence (dans les gaz frais) pour prédire les fluctuations du taux de réaction. Ces modèles sont testés numériquement et les résultats sont alors consistants lorsque le point de référence change ou lorsque les conditions acoustiques aux limites ont été changées. En outre, ces formulations étendues sont pleinement compatibles avec les approches ITM et il est possible de retrouver la même matrice de transfert.

Chapitre 5

Comparaison et extension des méthodes pour l'identification acoustique des brûleurs: article

Comparison and extension of methods for acoustic identification of burners

Truffin K.^{a,1} and Poinso T.^b

^aCERFACS, 42 Avenue G. Coriolis, 31057 Toulouse cedex, France

^bInstitut de Mécanique des Fluides de Toulouse, Avenue C. Soula, 31400 Toulouse, France

Abstract

The prediction and the control of combustion instabilities require the identification of the combustion chamber response. This identification is usually performed by forcing the combustor (for example modulating its inlet velocity) and measuring its response. Two methods may be found in the literature to analyze this response: identification of transfer matrices (ITM) and flame transfer functions (FTF). In ITM approaches, the burner is considered as a "black box" and a two-ports formulation (based on acoustic pressure and velocity perturbations) is used to construct a transfer matrix linking acoustic fluctuations on both sides of the burner. A drawback of this method is that in experiments, the measurement of unsteady pressure and velocity in burnt gases can be a difficult and noisy task. In FTF approaches, pressure measurements are replaced by a global heat release measurement (usually based on optical methods). The heat release fluctuations are then related to the flow velocity modulations at a reference point (usually the combustor inlet) through a transfer function. Both ITM and FTF methods can be used experimentally or numerically but a numerical simulation allows a verification of both concepts: this paper uses a compressible numerical simulation of a forced laminar Bunsen flame to analyze both methods. Results show that FTF approaches lead to an ill-defined problem as soon as the reference point is not close enough to the chamber. This "compactness" limit is quantified here in terms of distance between the reference point and the local chamber. The source of the problem is that FTF approaches correlate heat release fluctuations to velocity oscillations only: extended FTF models are then proposed using the local unsteady pressure as well as the velocity upstream of the flame to predict the heat release oscillations. These models are tested numerically and provides consistent values when the reference point location changes or when upstream and downstream conditions are varied. These extended models are also fully compatible with ITM approaches and provide exactly the same matrices as ITM techniques. These results lead to simple recommendations for experimentalists performing system identification.

keyword

Flame transfer functions; identification of transfer matrices; boundary conditions; LES.

1. Corresponding author. Tel: +33-5-61-19-3190; fax: +33-5-61-19-3030; e-mail:karine.truffin@cerfacs.fr

5.1 Introduction and configuration

To predict and avoid the instabilities which are sometimes encountered during the design phases of modern combustion chambers [152,20,35,153], a well-known method is the identification of the combustion chamber response: acoustic waves are introduced in the combustor using loudspeakers or rotating valves and the combustor response is measured.

Two theoretical frameworks are generally used to characterize this response:

- the identification of transfer matrices (ITM) [3,156,137,135,136],
- the flame transfer function (FTF) [153,36,37,92,11,27,18].

In ITM approaches each element of the burner is characterized by a transfer matrix linking the velocity and pressure perturbations at the inlet (index 1) and outlet (index 2) of the element (Fig. 5.1):

$$\begin{pmatrix} p'_r \\ u'_r \end{pmatrix} = \mathcal{M} \begin{pmatrix} p'_l \\ u'_l \end{pmatrix} \quad \text{with} \quad \mathcal{M} = \begin{bmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{bmatrix} \quad (5.1)$$

where the four coefficients of \mathcal{M} are complex numbers. The element containing the flame is treated like all others so that the flame effect is included in the matrix of this element.

FTF models also describe the acoustic propagation upstream and downstream of the burner with transfer matrices like in the transfer matrix but the treatment of the flame element is different: the FTF views the flame as a thin interface separating two elements of the burner (Fig. 5.2). For this interface the transfer function F is defined as the ratio of the oscillating heat release $\dot{\Omega}'_T$ and the unsteady inlet velocity u' :

$$F(\omega) = \frac{\dot{\Omega}'_T(\omega)}{u'(a,\omega)} \quad (5.2)$$

where ω is the pulsation. Many forms of FTF models can be found: the simplest one is the $n - \tau$ model [18,195,169] for which the transfer function is approximated by $F(\omega) = ne^{i\omega\tau}$. The time τ and the interaction index n characterize respectively the delay and the response intensity between inlet velocity fluctuations $u'(a,t)$ and total unsteady heat release: $\dot{\Omega}'_T$

$$\frac{\gamma - 1}{\rho_1 c_1^2} \dot{\Omega}'_T(t) = S_1 n u'(a, t - \tau) \quad (5.3)$$

Note that the velocity oscillations are measured at a point a (usually in the fresh gases upstream of the flame: see Fig. 5.2) while the heat release fluctuations are integrated over the total combustor volume. The parameters n and τ depend on the pulsation frequency and are building blocks for acoustic codes which predict the overall stability of burners [153,45,93]. The whole procedure is limited to low-frequency longitudinal modes.

Both ITM and FTF approaches are used in the literature to process experimental data. ITM approaches require measurements of unsteady pressure in the burnt gases which can be difficult and costly. FTF approaches use measurements of velocity (which are easy using hot wire anemometry) and of unsteady heat release (using for instance CH chemiluminescence signal). Both ITM and FTF can also be used numerically. The objective of this paper is not to discuss the practical aspects of both methods but their theoretical validity. More precisely, the following questions will be addressed:

- A0 - The link between both approaches will be demonstrated to show that both methods are theoretically equivalent.
- A1 - To use FTF methods, an additional condition must be met: the distance L^{af} between the reference point a (Fig. 5.2) and the center of the flame must be small. The validity of this "compactness" assumption is usually investigated by computing the Helmholtz number $H = \omega L^{af}/c$ which must remain small. H is also equal to $2\pi L^{af}/\lambda$ where λ is the acoustic wavelength. In experiments, the reference point is usually not directly placed at the chamber inlet for obvious practical reasons. Moreover the flame itself is often not compact. Therefore an interesting question is to know how large H can be before results lose their accuracy.
- A2 - To perform measurements with larger H values, i.e. for points which are away from the chamber inlet plane, can FTF methods be modified?

The reasons motivating these questions are that performing system identification using FTF models should lead to a result which is weakly dependent on the reference point a and totally independent of the acoustic conditions upstream and downstream of the chamber². The flame transfer function is supposed to characterize a combustion response which does not depend on the details of the acoustic field but only of the fluctuating inlet velocity. If this is not the case the whole procedure provides a transfer function which does not depend only of the combustor but also of all feeding and exhaust lines so that the results are useless: a transfer function measured in a given laboratory for example will not match the transfer function measured in another laboratory for the same burner and combustion chamber (or in the real turbine) if the feeding and exhaust lines differ.

Section 5.2 first describes the construction of the matrices and the link between both methods (question A0). To be able to answer questions A1 and A2, a prototype configuration is then considered and a full numerical simulation of the compressible reactive flow in this combustor is used to measure all quantities ($p'_r, u'_r, p'_l, u'_l, u'(a)$ and $\dot{\Omega}'_T$) needed to apply ITM or FTF approaches. This prototype corresponds to a simple premixed laminar flame to eliminate sources

². This condition is satisfied by ITM methods. If properly measured, the matrix \mathcal{M} of Eq. 5.1 must depend only on mechanisms occurring within the dashed box (Fig. 5.1) and not on upstream or downstream conditions.

of uncertainty due to turbulent fluctuations. Its flame response was measured experimentally by Le Helley [97] and numerically by Kaufmann et al. [77] using a specific FTF model which is the $n - \tau$ model. The present work uses a numerical simulation in which both the reference point (a) and the acoustic conditions on both sides of the chamber can be modified. The $n - \tau$ parameters are measured for each case and compared. Section 5.3 briefly describes the numerical method and the technique used for boundary conditions. Section 5.4 presents the results obtained with the standard $n - \tau$ model for different positions of the reference point a and demonstrates that only very low values of L^{af} allow consistent FTF results. Section 5.5 shows how FTF models can be extended to provide results which do not depend on the acoustic conditions upstream and downstream of the burner (question A3) and finally section 5.6 demonstrates that these extended FTF methods are fully equivalent to ITM techniques.

5.2 Methods for system identification

5.2.1 Acoustics in reacting flows

Since acoustics are an essential mechanism controlling combustion instabilities, a brief outline of the derivation of wave equations in reacting flows is first given. A detailed description and discussion of its limits is provided in [35,153,131][Ffowcs Williams,1982]. For reacting flows at low Mach number the wave equations are derived from the main conservation equations: continuity and momentum. Neglecting viscous and volume forces the starting equations are:

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho + \frac{\partial}{\partial x_i}\rho u_i = 0 \quad (5.4)$$

$$\rho \frac{\partial}{\partial t}u_i = -\frac{\partial}{\partial x_i}p \quad (5.5)$$

where ρ is the density, u_i ($i = 1,2,3$) are the velocity components and p is the pressure. The energy equation is also required:

$$\rho C_p \frac{\partial}{\partial t}T = \dot{\omega}_T + \frac{\partial}{\partial t}p - (\rho C_p u_i) \frac{\partial}{\partial x_i}T \quad (5.6)$$

where C_p is the specific heat at constant pressure, T is the temperature and $\dot{\omega}_T$ is the heat release rate. Eqs. (5.4) and (5.6) may be combined using the ideal gas equation $p = \rho rT$. For longitudinal one-dimensional waves, the previous equations may be linearized assuming small acoustic fluctuations (ρ' , p' , u') compared to the mean flow (ρ_0 , p_0 , u_0):

$$p(x,t) \approx p_0 + p'(x,t) \quad \rho(x,t) = \rho_0(x) + \rho'(x,t) \quad u(x,t) = u_0(x) + u'(x,t) \quad (5.7)$$

The integration across a duct of variable cross section (see Fig. 5.3) leads to the following acoustic model:

$$\rho \frac{\partial}{\partial t} u' = -\frac{1}{\rho_0} \frac{\partial}{\partial x} p' \quad (5.8)$$

$$\frac{1}{\gamma p_0} \frac{\partial}{\partial t} p' + \frac{1}{S} \frac{\partial}{\partial x} (S u') = \frac{\gamma - 1}{\gamma p_0} \dot{\omega}'_T \quad (5.9)$$

where γ is the ratio of specific heats, $\dot{\omega}'_T$ is the fluctuating heat release and $S(x)$ is the cross section.

5.2.2 Flame transfer function formulations (FTF)

Acoustic jump conditions for thin flames

The investigation is limited to piecewise constant duct cross sections with constant mean temperature. If the flame is compact and located in one section ($x = x_l$ in Fig. 5.3), all duct elements upstream and downstream of the flame can be merged into one single duct on the left (called "l" here) and one duct on the right (called "r"). The jump conditions at the flame may be formulated by integration of Eqs. (5.8) and (5.9) (see Fig. 5.3) from $x = x_l^-$ to $x = x_l^+$ and taking the limit where x_l^- and x_l^+ go to x_l :

$$p'(x_l^+) = p'(x_l^-) \quad (5.10)$$

$$S(x_l^+)u'(x_l^+) - S(x_l^-)u'(x_l^-) = \frac{\gamma - 1}{\gamma p_0} \dot{\Omega}'_T \quad (5.11)$$

where $\dot{\Omega}'_T = \int_{x_l^-}^{x_l^+} S \dot{\omega}'_T dx$ is the total unsteady heat release in the combustor. These equations show that a compact flame front does not introduce an unsteady pressure jump but a source of volume flow rates. Assuming harmonic variations for any variable f ($f' = \hat{f} e^{-i\omega t}$), the acoustic pressure and velocity amplitudes are written in duct l :

$$\hat{p}(x \leq x_l) = A_l^+ e^{ik_l(x-x_0)} + A_l^- e^{-ik_l(x-x_0)} \quad (5.12)$$

$$\hat{u}(x \leq x_l) = \frac{A_l^+}{\rho_l c_l} e^{ik_l(x-x_0)} - \frac{A_l^-}{\rho_l c_l} e^{-ik_l(x-x_0)} \quad (5.13)$$

and in duct r :

$$\hat{p}(x \geq x_l) = A_r^+ e^{ik_r(x-x_l)} + A_r^- e^{-ik_r(x-x_l)} \quad (5.14)$$

$$\hat{u}(x \geq x_l) = \frac{A_r^+}{\rho_r c_r} e^{ik_r(x-x_l)} - \frac{A_r^-}{\rho_r c_r} e^{-ik_r(x-x_l)} \quad (5.15)$$

where $c_l, k_l = \omega/c_l, \rho_l, c_r, k_r = \omega/c_r$ and ρ_r are the sound speeds, the wave numbers and the mean density in sections l and r respectively. The unsteady heat release is also supposed to be harmonic:

$$\dot{\Omega}'_T(t) = \hat{\Omega} e^{-i\omega t} \quad (5.16)$$

Transfer matrix for wave amplitudes

A transfer matrix between the wave amplitudes in ducts l and r can be derived for Fig. 5.3 by replacing Eqs. (5.12) to (5.16) into the generalized jump conditions (5.10) and (5.11):

$$A_r^+ + A_r^- = A_l^+ e^{ik_l l} + A_l^- e^{-ik_l l} \quad (5.17)$$

$$\frac{S_r}{\rho_r c_r} (A_r^+ - A_r^-) = \frac{S_l}{\rho_l c_l} (A_l^+ e^{ik_l l} - A_l^- e^{-ik_l l}) + \frac{\gamma - 1}{\rho_l c_l^2} \hat{\Omega} \quad (5.18)$$

Defining $\Gamma_l = \frac{S_l \rho_r c_r}{S_r \rho_l c_l}$ leads to a matrix \mathcal{T}_l linking wave amplitudes :

$$\begin{pmatrix} A_r^+ \\ A_r^- \end{pmatrix} = \mathcal{T}_l \begin{pmatrix} A_l^+ \\ A_l^- \end{pmatrix} + \mathcal{O}_l \quad (5.19)$$

where the transfer matrix \mathcal{T}_l and the source term due to combustion \mathcal{O}_l are respectively defined as:

$$\mathcal{T}_l = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} e^{ik_l l}(1 + \Gamma_l) & e^{-ik_l l}(1 - \Gamma_l) \\ e^{ik_l l}(1 - \Gamma_l) & e^{-ik_l l}(1 + \Gamma_l) \end{pmatrix} \quad (5.20)$$

and

$$\mathcal{O}_l = \frac{1}{2} \frac{\rho_r c_r}{S_r} \frac{\gamma - 1}{\rho_l c_l^2} \hat{\Omega} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \quad (5.21)$$

Using the reflection coefficients at boundaries with Eq. (5.19):

$$R_l = \frac{A_l^+}{A_l^-} \quad \text{and} \quad R_r = \frac{A_r^+}{A_r^-} e^{2ik_r r} \quad (5.22)$$

leads to a linear system that is closed if the source term \mathcal{O}_l (i.e. the unsteady heat release $\hat{\Omega}$) is known.

Flame transfer function closures

Many mechanisms are responsible for heat release fluctuations: large scale coherent structures, fluctuations of the equivalence ratio, fluctuations in the strain rate, flame / walls interactions. Therefore, constructing a model for the unsteady heat release $\hat{\Omega}$ is complex and simplifications are required. Standard FTF approaches do not attempt to account for all these phenomena; they simply assume that the oscillatory combustion is controlled by one mechanism only: the flow velocity modulations at the combustion inlet:

$$\frac{\hat{\Omega}}{\hat{\Omega}_{T,0}} = F(\omega) \cdot \frac{\hat{u}(x_a)}{c_l} \quad (5.23)$$

where $\dot{\Omega}_{T,0} = \int \dot{\omega}_T dV$ is the mean integrated heat release.³ The simplest FTF model ($n - \tau$) was first introduced by Crocco [36,37]:

$$\hat{\Omega} = S_l \frac{\rho_l c_l^2}{\gamma - 1} n e^{i\omega\tau} \hat{u}(x_a) \quad (5.25)$$

Eq. (5.25) states that the time delay between unsteady velocity at a point a and unsteady heat release is τ . The $S_l \rho_l c_l^2 / (\gamma - 1)$ term is a normalization factor and n measures the intensity of the response. In practice, n and τ can be measured experimentally [18,97] or computed [77,170,98]. In the low frequency limit, many analytical flame transfer functions can be found in the literature. Most of them are based on a thin flame assumption. The transfer function is often approximated as a first-order system [123]. An analysis of the flame transfer function is realized by Fleifil et al. [58] in the case of axisymmetric configuration and uniform perturbations. Extensions of Ref.[58] to laminar conical flames are investigated by Matsui [118], Ducruix et al. [51] and Schuller et al. [170]. Application of Ref.[58] to V-flames stabilised on a central body are provided by Dowling [46] and Schuller et al. [170]. In complex geometries, Large Eddy Simulations or experiments must replace analytical methods to evaluate the transfer function. Using Eq. (5.25), Eq. (5.19) with boundary conditions (5.22) can then be solved to provide the eigenfrequencies and the growth rates of unstable modes [153].

5.2.3 Identification of transfer matrices (ITM)

ITM approaches link the acoustic perturbations at the inlet (left) and outlet (right) sections of the combustor (Fig. 3) by:

$$\begin{pmatrix} \hat{p}_r \\ \hat{u}_r \end{pmatrix} = \mathcal{M} \begin{pmatrix} \hat{p}_l \\ \hat{u}_l \end{pmatrix} \quad \text{with} \quad \mathcal{M} = \begin{bmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{bmatrix} \quad (5.26)$$

To close the ITM model, boundary conditions are expressed in terms of primitive variables, typically impedances in sections l and r (Fig. 3). Eq. (5.26) with these boundary conditions is then a linear system providing the eigenfrequencies and growth rates of all modes.

The identification (i.e. the determination of the M_{ij} coefficients) for ITM methods is done as follows. For convenience the notations \hat{p}_l , \hat{u}_l , \hat{p}_r and \hat{u}_r stand in for $\hat{p}_l(0)$, $\hat{u}_l(0)$, $\hat{p}_r(l+r)$ and $\hat{u}_r(l+r)$ respectively (Fig. 5.3). Eq. (5.26) contains four complex unknowns (the coefficients of the matrix \mathcal{M}) and only two equations. A second state must be created to have two more

3. Assuming that all the fuel is burnt $\dot{\Omega}_{T,0}$ may be estimated using the fuel mass flow rate \dot{m}_F and the heat of reaction Q :

$$\dot{\Omega}_{T,0} = Q \dot{m}_F \quad (5.24)$$

equations. This state must be independent of the first one. Calling these two states (1) and (2), the following system is obtained:

$$\begin{pmatrix} \hat{p}_r^{(1)} \\ \hat{u}_r^{(1)} \\ \hat{p}_r^{(2)} \\ \hat{u}_r^{(2)} \end{pmatrix} \begin{bmatrix} M_{11} & M_{12} & 0 & 0 \\ M_{21} & M_{22} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & M_{11} & M_{12} \\ 0 & 0 & M_{21} & M_{22} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \hat{p}_l^{(1)} \\ \hat{u}_l^{(1)} \\ \hat{p}_l^{(2)} \\ \hat{u}_l^{(2)} \end{pmatrix} \quad (5.27)$$

A criterion to obtain two independent states is that the ratio of the waves going up and downstream of the burner must be different. Two standard methods are used in experiments to do this:

- the so-called *two-load method* [3,4,41] consists in modulating the inlet flow for states (1) and (2) and changing the outlet impedance to go from state (1) to state (2), for example by changing the length of the exhaust section downstream of section S_r (Fig. 5.3) or varying its impedance while keeping the same geometry,
- the *two source-location method* [3,4,41,138,132] consists in modulating the inlet flow for state (1) and the outlet flow for state (2). Usually, state (1) is obtained by forcing the velocity and state (2) by modulating the outlet pressure.

Complete descriptions and analysis of these methods may be found in [3,4,165 – 167,53]. Comparison of both methods in [41] shows that when determining transfer matrices for a range of frequencies (with transient or random excitations), the 'two-source location' provides better results.

5.2.4 The link between FTF and ITM methods

For 1D acoustic waves, it is possible to show that FTF approaches can be formulated as a special ITM method, i.e. that a matrix linking states l and r can be derived from Eqs. (5.17) to (5.21). Such a demonstration has been first detailed by Chu [28], using conservation and kinematical conditions across a flame considered as a discontinuity. Relations linking the acoustic field down- and upstream of the thin flame are also given in [45,169]. Explicit relations linking the transfer matrix to the $n - \tau$ model in a Rijke tube are given in [156,157] or for a combustion model developed by Keller [80] in a burner with changing area in [169]. A brief demonstration is provided here for a reference point located at the inlet of the right duct ($x_a = x_l$). Starting from FTF formulations (5.23) linking the unsteady heat release to the velocity fluctuations measured at $x_a = x_l$ leads to:

$$\frac{\hat{\Omega}}{\hat{\Omega}_{T,0}} = F(\omega) \frac{\hat{u}_l(x_l)}{c_l} \quad (5.28)$$

Using Eq. (5.13) for $x = x_l$:

$$\frac{\hat{\Omega}}{\dot{\Omega}_{T,0}} = \frac{F(\omega)}{\rho_l c_l^2} \left(A_l^+ e^{ik_l l} - A_l^- e^{-ik_l l} \right) \quad (5.29)$$

Using Eq. (5.21) and replacing $\hat{\Omega}$ by expression (5.29) gives:

$$\mathcal{O}_l = \frac{1}{2} \Gamma_l K F(\omega) \begin{pmatrix} A_l^+ e^{ik_l l} - A_l^- e^{-ik_l l} \\ -A_l^+ e^{ik_l l} + A_l^- e^{-ik_l l} \end{pmatrix} \quad (5.30)$$

Finally combining Eq. (5.30) with the jump conditions (5.19) leads to a matrix relation between wave amplitudes in both sections:

$$\begin{pmatrix} A_r^+ \\ A_r^- \end{pmatrix} = \mathcal{H} \begin{pmatrix} A_l^+ \\ A_l^- \end{pmatrix} \quad (5.31)$$

with

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} e^{ik_l l} [1 + \Gamma_l (1 + KF(\omega))] & e^{-ik_l l} [1 - \Gamma_l (1 + KF(\omega))] \\ e^{ik_l l} [1 - \Gamma_l (1 + KF(\omega))] & e^{-ik_l l} [1 + \Gamma_l (1 + KF(\omega))] \end{pmatrix} \quad (5.32)$$

Eqs. (5.12) to (5.15) and Eq. (5.31) can be combined to obtain the matrix \mathcal{M} linking the pressure and velocity perturbations at $x = x_0$ and $x = x_r$:

$$\begin{pmatrix} \hat{p}_r \\ \hat{u}_r \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} e^{ik_r r} & e^{-ik_r r} \\ \frac{e^{ik_r r}}{\rho_r c_r} & -\frac{e^{-ik_r r}}{\rho_r c_r} \end{pmatrix} \mathcal{H} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \frac{1}{\rho_l c_l} & -\frac{1}{\rho_l c_l} \end{pmatrix}^{-1}}_{\mathcal{M}} \begin{pmatrix} \hat{p}_l \\ \hat{u}_l \end{pmatrix} \quad (5.33)$$

Developing Eq. (5.33) provides an expression for the coefficients of the transfer matrix \mathcal{M} which depend on the geometry of the burner and on the flame transfer form $F(\omega)$ (Table 5.1). A global transfer matrix \mathcal{M} can be formulated in a series of N connected ducts ($j = 1, N$) with one or many flames. Transfer matrices \mathcal{T}_j and source terms \mathcal{O}_j can be estimated in each duct section leading to a global matrix \mathcal{H} given in [153]. This result shows that using a flame transfer formulation is formally equivalent to using a matrix \mathcal{M} similar to the transfer matrices. It does not mean however that the FTF automatically satisfies criterion A2 listed in the introduction, like ITM methods do. This will be checked in the next sections by using a specific example.

5.3 System identification for a laminar burner

5.3.1 Numerical tool and boundary conditions

The numerical tool used for the simulations solves the complete compressible Navier-Stokes equations including chemistry in two and three space dimensions [77,33,174]. The data structure corresponds to hybrid grids where structured and unstructured meshes can be used.

- High-order schemes are used to minimize errors in the computations of transfer functions. The TTGC scheme implemented here offers third-order in space on hybrid meshes [33].
- Accurate unsteady boundary conditions are required to control the waves reflections and avoid the propagation of non-physical modes. The NSCBC method [151,8] is used to reach this goal here. The boundary conditions are formulated in terms of characteristic wave variations and allow to control the reflection coefficient R at the boundary.
- The forcing technique used for the unsteady case is the IWM (Inlet Wave Modulation) method [77]. This technique consists in modulating the acoustic wave entering the domain while letting the wave leaving the domain propagate without reflection.

5.3.2 Computation of a laminar Bunsen-type flame

The experimental configuration considered for the present investigation consists of a ducted premixed propane / air flame [97]. The conical flame is anchored on the rim of the burner: the flame stabilisation is produced by a perforated plate with 1880 holes of 0.125 mm in diameter each (Fig. 5.4). In the main longitudinal pipe, honeycomb stitches are placed to ensure laminar flow. The flame is excited by a loudspeaker located in the fresh gases (point A in Fig. 5.5). This burner is a proper prototype for studying the flame response to acoustic perturbations:

- It is acoustically compact: the combustion chamber is small compared to the acoustic wave length.
- The geometry is quasi one-dimensional: the whole system including acoustic and combustion can be modelled.
- The flow is laminar so that the flame response can be studied in the absence of uncertainties related to turbulent combustion models.

The computational domain given in Fig. 5.5 is reduced to a half burner including one hole of the perforated plate (Fig. 5.4). The axisymmetrical computational mesh allows the flame to be properly resolved on this mesh (10515 nodes). The laminar flame thickness is 0.3 mm while the typical mesh size is 0.043 mm. The chemical scheme used for this study takes into account five species (C_3H_8 , O_2 , CO_2 , H_2O and N_2) and a single step reaction modeled using an Arrhenius

law:

$$q = A \left(\frac{\rho Y_{C_3H_8}}{W_{C_3H_8}} \right)^{n_F} \left(\frac{\rho Y_{O_2}}{W_{O_2}} \right)^{n_O} \exp \left(-\frac{E_a}{RT} \right) \quad (5.34)$$

where q is the rate of the single reaction, $Y_{C_3H_8}$, Y_{O_2} , $W_{C_3H_8}$ and W_{O_2} are respectively the mass fractions and the molecular weights of propane and oxygen. The pre-exponential constant is $A = 3 \cdot 10^{10}$ cgs, the mass fraction exponents are $n_F = 0.85$ and $n_O = 0.50$ and the activation energy is $E_a = 31100$ cal.mol⁻¹. These parameters are fitted to produce correct flame speeds in the range of equivalence ratios of Le Helley's experiment. The acoustic modulation at the inlet is kept to 10% of the mean velocity (4 m.s⁻¹) and remains within the linear acoustic domain. Fig. 5.6 shows four snapshots of the flame during one cycle at 500 Hz. The flame position changes from 1.8 mm to 2.2 mm. The relative variations of the heat release rate are 12% while the relative inlet velocity changes are 10%.

5.4 Results using a specific FTF model: the $n - \tau$ approach

The regime investigated both numerically and experimentally corresponds to a flow rate of 10.86 g.s⁻¹ (for the whole burner) and an equivalence ratio of 1.2. The inlet temperature is 300 K and the pressure is 1 bar. In the experiment of Le Helley, a hot wire is placed 2.9 cm (point C in Fig. 5.4) upstream of the flameholder to measure the velocity $u'(t)$. Integral heat release fluctuations are measured by a photo multiplier. In the calculation temporal signals of integrated heat release $\dot{\Omega}'_T$ and velocity $u'(a,t)$ are stored. The n and τ parameters can then be obtained using Eq. 5.25 and the Fourier transform of these temporal signals. Calculations were performed for different reflection coefficients at the outlet (point E in Fig. 5.5) at a forcing frequency of 500 Hz.

Fig. 5.7 shows the mode structure measured in the simulation inside the upstream duct ($x < 0$ mm). Simply observing the shapes of the modes in Fig. 5.7 demonstrates that choosing the location for the reference point is critical: obviously $u'(a,t)$ will change significantly when x_a varies between -600 and 0 mm and the transfer function parameters n and τ will also vary. Various outlet reflection coefficients R_E have been tested at $x = 8$ mm (point E) from almost non reflecting ($R_E = 0.05$) to fully reflecting ($R_E = 1$ or $p'(x_E) = 0$).

Three reference points were tested to evaluate the velocity fluctuations (Fig. 5.5):

- point D is at the chamber inlet plane,
- point C is 2.9 cm upstream of the chamber inlet. This is the point used for measurements,

– point B is 30 cm upstream of the chamber inlet. This point is chosen so as to avoid singularities, like pressure or velocity extrema as seen in Fig. 5.7.

The Helmholtz number H can be estimated at each point (B, C or D) using the distance L^{af} (Fig. 5.2) between the reference point (x_B , x_C or x_D) and the center of the flame (located at $x_f \approx x_{tf}/2 = 1$ mm on Fig. 5.5). The value for H (given on Fig. 5.5) is $9.0 \cdot 10^{-3}$ at point D and 2.7 at point B. The values for the transfer function parameters are given in Fig. 5.8. The transfer function parameters calculated using point D seem to be independent of the reflection coefficient. On the contrary, the values of n and τ obtained using points B or C present a strong dependance with R_E . n varies non linearly within a factor 1.8 for point B and 1.4 for point C when the outlet reflection coefficient R_E varies while a maximum deviation of 36 % for point B and 16% for point C are observed for τ . When the reference point is C like in the experiment and the outlet reflection coefficient is zero like in the experiment, the computation recovers both the values of n (4.3) and τ (0.47 ms). However, as soon as the outlet reflection changes, results for n and τ change for reference points B or C showing that criteria A2 is not satisfied: changing the reference point from B to C or D changes both n and τ . The only situation which provides results which are independent of the boundary conditions is to use point D (the closest point to the chamber inlet) as a reference point. In this case results are independent of the outlet reflection coefficient R_E . These results show that the $n - \tau$ model is not well adapted when the point used to measure velocity oscillations is too far from the flame. In that situation, the reference velocity oscillations $u'(a,t)$ are disturbed by the reflecting waves imposed by the geometry. This conclusion is not surprising since the initial Crocco model assumed the flame to be compact, i.e. that the distance between reference point and flame must be small compared to the acoustic wavelength. The calculation of the Helmholtz number shows that very small values ($H \propto 10^{-3}$) are required to obtain values of phase and gain of the flame response which are independent of the outlet reflection coefficient. The present results help to quantify this constraint: for points B and C with H values of 2.7 and 0.27 respectively, the "compact" assumption is obviously not valid. However at point D which is close to the flame ($H = 9 \cdot 10^{-3}$), the standard $n - \tau$ model seems to perform reasonably. This is however a significant difficulty for experimental studies where the reference point is rarely very close to the flame for practical reasons.

5.5 Extended FTF models

The essential drawback of the $n - \tau$ model evidenced in the previous sections comes from the fact that it tries to correlate heat release perturbations to velocity perturbations only. In this section extended FTF models are proposed to build a consistent formulation which can be used for any location of the reference point. These models are formulated using the local unsteady pressure and velocity measured upstream of the flame:

$$\frac{\hat{\Omega}}{\hat{\Omega}_{T,0}} = F_u(\omega) \frac{\hat{u}_l(x_a)}{c_l} + F_p(\omega) \frac{\hat{p}_l(x_a)}{p_l} e^{i\omega\tau_p} \quad (5.35)$$

In the specific case of the $n - \tau$ model $F_u(\omega) = A_u e^{i\omega\tau_u}$ and $F_p(\omega) = A_p e^{i\omega\tau_p}$ so that:

$$\frac{\hat{\Omega}}{\hat{\Omega}_{T,0}} = A_u \frac{\hat{u}_l(x_a)}{c_l} e^{i\omega\tau_u} + A_p \frac{\hat{p}_l(x_a)}{p_l} e^{i\omega\tau_p} \quad (5.36)$$

where the unsteady velocity, pressure and heat release are scaled respectively by the sound speed c_l , the mean pressure p_l and Eq. (5.36) contains four unknowns A_u , A_p , τ_u and τ_p which depend on the point where velocity and pressure fluctuations are measured. These parameters may be determined by using two sets of independent measurements like for ITM methods.⁴ As explained in Section 5.2.3 different techniques may be used to obtain two independent states. Here states (1) correspond to simulations with minimum reflection at boundaries (Table 5.2). States (2) are obtained by modifying the location of the acoustic source and/or by increasing the reflection coefficient at one boundary (right or left). The resulting states are classified in three test cases (Table 5.2):

- Case 1: for states (1) and (2) the velocity is modulated on the left side (upstream of the flame) and the outlet reflection coefficient R_E of state (2) is changed.
- Case 2: states (1) and (2) are obtained by applying forcing on the right and left sides respectively and by increasing the outlet impedance of state (2).
- Case 3: states (1) and (2) are obtained by applying forcing on the left and right sides respectively and by increasing the inlet impedance of state (2).

The calculations described in section 5.4 are used to determine the parameters of the extended $n - \tau$ model. The velocity and pressure fluctuations are measured at points B ($x = -300$ mm), C ($x = -29$ mm) and D (chamber inlet). The coefficients are displayed in Figs. 5.9 to 5.11 at the forcing frequency 500 Hz. For case 1 care is taken to select different load impedances between

4. If the transfer matrix \mathcal{M}^{aD} between the reference point (a) and the burner mouth (point D in Fig. 5.5) is known analytically, then one state can be sufficient: in this case, the velocity signal at the burner mouth \hat{u}_D can be obtained by $\hat{u}_D = \mathcal{M}_{21}^{aD} \frac{\hat{p}_a}{\rho c} + \mathcal{M}_{22}^{aD} \hat{u}_a$ and the standard $n - \tau$ model can be applied by determining n and τ such that $\hat{\Omega} = n e^{i\omega\tau} \hat{u}_D$. However in many cases, the transfer matrix \mathcal{M}^{aD} is not known in which case two states are needed.

states (1) and (2): indeed, if the outlet reflection coefficients R_E used for states (1) and (2) are too close, the two states become linearly dependent leading to an ill-posed formulation. Typically R_E was set to 0.05 for state (1) and varies between 0.5 and 1 for states (2).

For the three points (B, C and D) cases 1, 2 and 3 provide almost constant values when the reflection coefficient R_E . Any upstream reference point can be chosen (point B in Fig. 5.9, C in Fig. 5.10 or D in Fig. 5.11) and provides results for A_u , A_p , τ_u and τ_p which do not depend on the upstream or downstream boundary conditions (R_A or R_E).

An explanation for the deviations obtained with the standard $n - \tau$ model (section 5.4) is also possible when comparing the amplification factors A_u and A_p . Using point B or C which are located respectively 300 and 29 mm upstream of the chamber A_u and A_p values are of the same order: $A_p/A_u \approx 0.16$ to 0.33 in Figs. 5.9 and 5.10 (a),(c). This does not mean that the pressure fluctuations influence the combustion but that at this point both quantities u' and p' are needed to describe the response of the flame to acoustic perturbations. Using point D which is in the inlet plane of the chamber A_p is much lower than A_u : $A_p/A_u \approx 0.04$ in Fig. 5.11(a),(c): at the chamber inlet the effect of pressure modulations on combustion is negligible confirming the steering idea of the $n - \tau$ model as stated by Crocco [36,37]. However, A_p does not go exactly to zero for low values of H (points close to the burner mouth) showing the limits of the "compactness" assumption used in most FTF approaches. Evaluating A_p is therefore a useful exercise to verify the validity of FTF measurements.⁵

5.6 Equivalence of ITM and extended FTF methods

It is possible to demonstrate that extended FTF models are fully compatible with ITM approaches by performing the following test (Fig. 5.12): consider any point located upstream of the chamber ($x < 0$ in Fig. 5.5); perform first system identification using ITM methods between this point and the outlet of the chamber (point E in Fig. 5.12) to obtain a transfer matrix \mathcal{M} between the reference point and the outlet point E. Second, measure the coefficients $F_u(\omega)$ and $F_p(\omega)$ using extended FTF methods and from these coefficients, use Table 5.3 to construct a second transfer matrix \mathcal{M}' between the reference point and the outlet point E.⁶ These two matrices

5. Note that at Point D the error in the evaluation of the delay τ_p can reach 15% in Fig. 5.11(d) because A_p is very small: the flame is almost insensitive to pressure at point D and the measurement of a delay is noisy.

6. When the reference point is B or C (Fig. 5.5), the section change at $x = -12$ mm must also be accounted for. Moreover, when the reference point is close to a pressure or velocity node in the upstream duct, it is more convenient to determine the amplitudes of the up and downstream waves travelling in the duct as discussed in [3,135,138]. Reconstructing the matrix \mathcal{M} from these waves is simple using Eq. (9) in Ref.[135].

should be the same. This is demonstrated in Fig. 5.13 which gives the amplitude and phase of the four complex coefficients M_{ij} obtained by ITM methods (circles) and by extended FTF models (solid line).

The excellent agreement obtained for all values of the reference point between point D ($x = 0$ mm) located at the chamber inlet and point B ($x = -300$ mm) located far upstream of the chamber shows that extended FTF methods are indeed equivalent to ITM approaches. This has important consequences: while the previous sections had shown that standard FTF models were reliable only for very small values of the Helmholtz number ($H < 10^{-2}$), it is now clear that extended FTF models can provide consistent results for all values of H and are also fully compatible with ITM approaches. Experimentally, this means that ITM approaches (which are often difficult to use) can be replaced by extended FTF methods which are sometimes simpler to implement. It will however require that experimentalists measure not only u' at the reference point but also p' (in the fresh gases).

5.7 Conclusion

In this paper, the two standard methods for system identification of combustors have been compared:

- ITM methods [169,138] in which pressure and velocity perturbations upstream and downstream of the flame are correlated through a single transfer matrix \mathcal{M} ,
- FTF methods in which the global unsteady heat release is correlated to the upstream velocity oscillations at a point (a).

It was first shown that using FTF methods are formally equivalent to using a simplified transfer matrix. However, a simulation of a laminar flame using various reference points (a) and various outlet reflection coefficients was performed to demonstrate that FTF models can not be used reliably when the reference point is not very close to the chamber inlet: in those cases, the gain and phase of the transfer function $F(\omega)$ depend both on the point location and on the acoustic states upstream and downstream of the chamber. Typically, the distance between reference point and chamber inlet must be such that the Helmholtz number $H = \omega L^{af}/c$ is smaller than 0.01 to obtain consistent results. In practice, this would imply that combustors transfer functions measured or computed for reference points which are not located close enough to the chamber are not intrinsic parameters of the chamber but depend also on upstream and downstream conditions: a combustion chamber installed in a laboratory environment, in which upstream and downstream acoustic conditions are different from the real machine, will have a different transfer function so that the laboratory measurements become useless for the real device.

To overcome this difficulty, ITM methods can be used but these methods are sometimes difficult to implement experimentally because precise acoustic measurements are required in the burnt gases. The alternative solution proposed in this work is to extend FTF methods by expressing the unsteady reaction rate as a function of both local velocity and pressure oscillations. It was shown that these techniques provides consistent results: the transfer function obtained by the extended $n - \tau$ model does not depend on the acoustic conditions upstream and downstream of the burner. Moreover the transfer matrix which can be deduced from extended FTF formulations is exactly the one obtained by ITM techniques. These results suggest that experimental and computational studies of flame transfer functions could be performed with this extended methods: in practice, this would mean measuring not only the unsteady velocity at the reference point (done usually with hot wire anemometry) but also the unsteady pressure (which is easy at the reference points because they are located in fresh gases).

5.8 Tables

Transfer matrix coefficients	
$M_{11} =$	$\cos(k_l l) \cos(k_r r) - \Gamma_l (1 + KF(\omega)) \sin(k_l l) \sin(k_r r)$
$M_{12} =$	$i \rho_l c_l (\sin(k_l l) \cos(k_r r) + \Gamma_l (1 + KF(\omega)) \cos(k_l l) \sin(k_r r))$
$M_{21} =$	$\frac{i}{\rho_r c_r} (\cos(k_l l) \sin(k_r r) + \Gamma_l (1 + KF(\omega)) \sin(k_l l) \cos(k_r r))$
$M_{22} =$	$\frac{\rho_l c_l}{\rho_r c_r} (-\sin(k_l l) \sin(k_r r) + \Gamma_l (1 + KF(\omega)) \cos(k_l l) \cos(k_r r))$
with $K = \frac{\gamma-1}{\rho_l c_l^3} \frac{\Omega_{T,0}}{S_l}$	

TAB. 5.1 – Coefficients of the transfer matrix \mathcal{M} obtained with FTF models.

Cases	Acoustic waves at boundaries	State 1	State 2
Case 1	Forcing is applied		left
	Reflection coefficient	R_A	0.1
		R_E	R_E goes from 0.5 to 1
Case 2	Forcing is applied		right
	Reflection coefficient	R_A	0.1
		R_E	R_E goes from 0.05 to 1
Case 3	Forcing is applied		left
	Reflection coefficient	R_A	R_A varies from 0.1 to 1
		R_E	0.05

TAB. 5.2 – Set of states used for the calculation of the flame transfer functions. Three cases are chosen for comparisons.

5.9 Figures

Transfer matrix coefficients	
$M_{11} =$	$\cos(k_l l)\cos(k_r r) - \Gamma_l (1 + KF_u(\omega)) \sin(k_l l)\sin(k_r r) + i\gamma\Gamma_l KF_p(\omega)\cos(k_l l)\sin(k_r r)$
$M_{12} =$	$i\rho_l c_l (\sin(k_l l)\cos(k_r r) + \Gamma_l (1 + KF_u(\omega)) \cos(k_l l)\sin(k_r r) + i\gamma\Gamma_l KF_p(\omega)\sin(k_l l)\sin(k_r r))$
$M_{21} =$	$\frac{i}{\rho_r c_r} (\cos(k_l l)\sin(k_r r) + \Gamma_l (1 + KF_u(\omega)) \sin(k_l l)\cos(k_r r) - i\gamma\Gamma_l KF_p(\omega)\cos(k_l l)\cos(k_r r))$
$M_{22} =$	$\frac{\rho_l c_l}{\rho_r c_r} (-\sin(k_l l)\sin(k_r r) + \Gamma_l (1 + F_u(\omega)) \cos(k_l l)\cos(k_r r) + i\gamma\Gamma_l KF_p(\omega)\sin(k_l l)\cos(k_r r))$
with $K = \frac{\gamma-1}{\rho_l c_l^3} \frac{\dot{\Omega}_{T,0}}{S_l}$	

FIG. 5.3 – Coefficients of the transfer matrix \mathcal{M} obtained with extended FTF models.

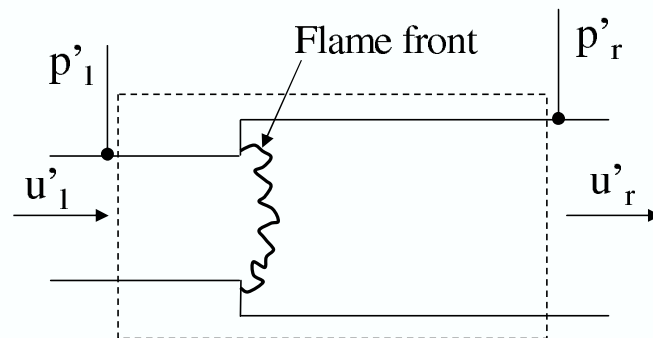


FIG. 5.1 – ITM approaches: the flame effect is contained in the matrix of the element where the flame is located.

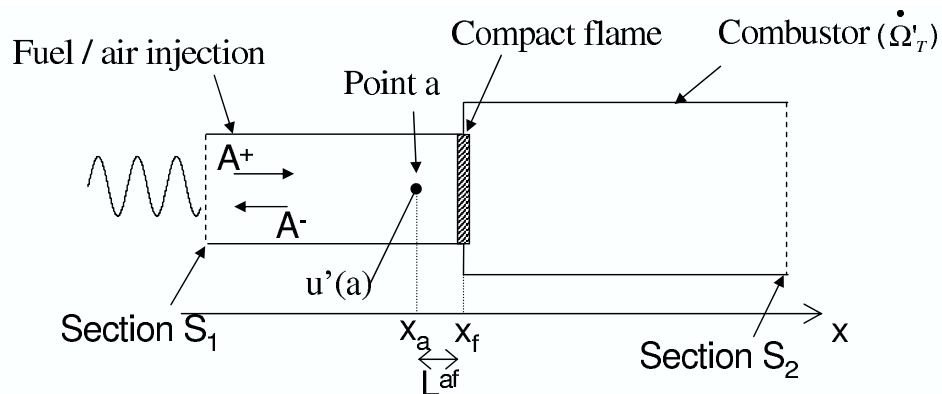


FIG. 5.2 – FTF approaches: the inlet velocity reference is measured at a point a .

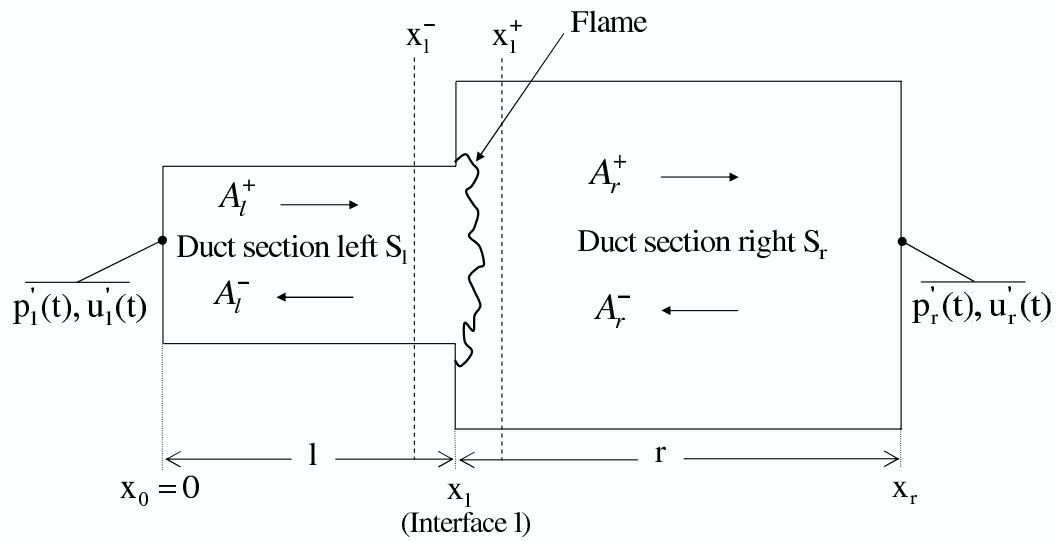


FIG. 5.3 – Decomposition of the combustor into two-dimensional sections.

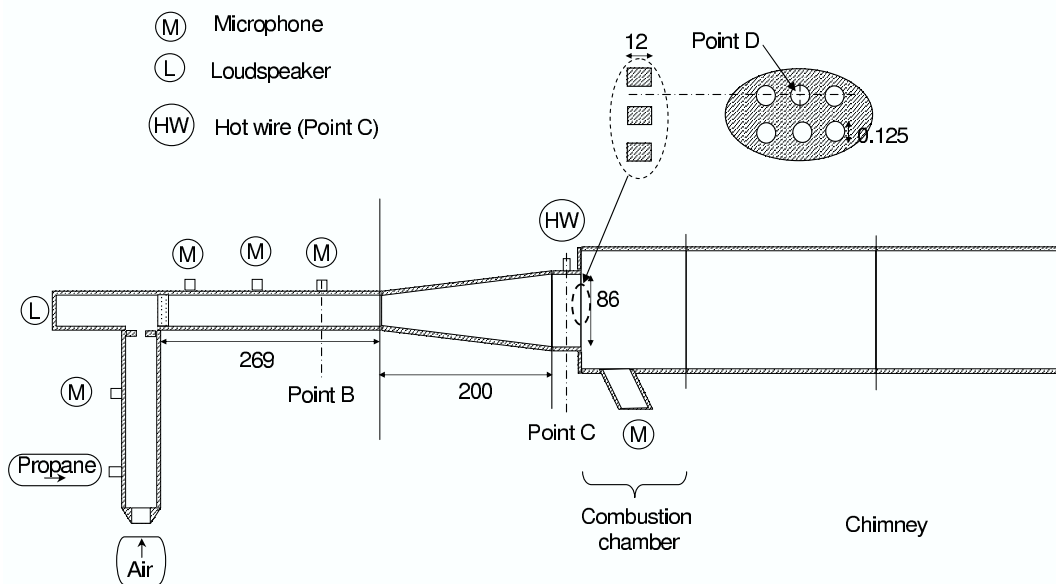


FIG. 5.4 – Experimental setup of the burner. The dimensions are given in *mm*.

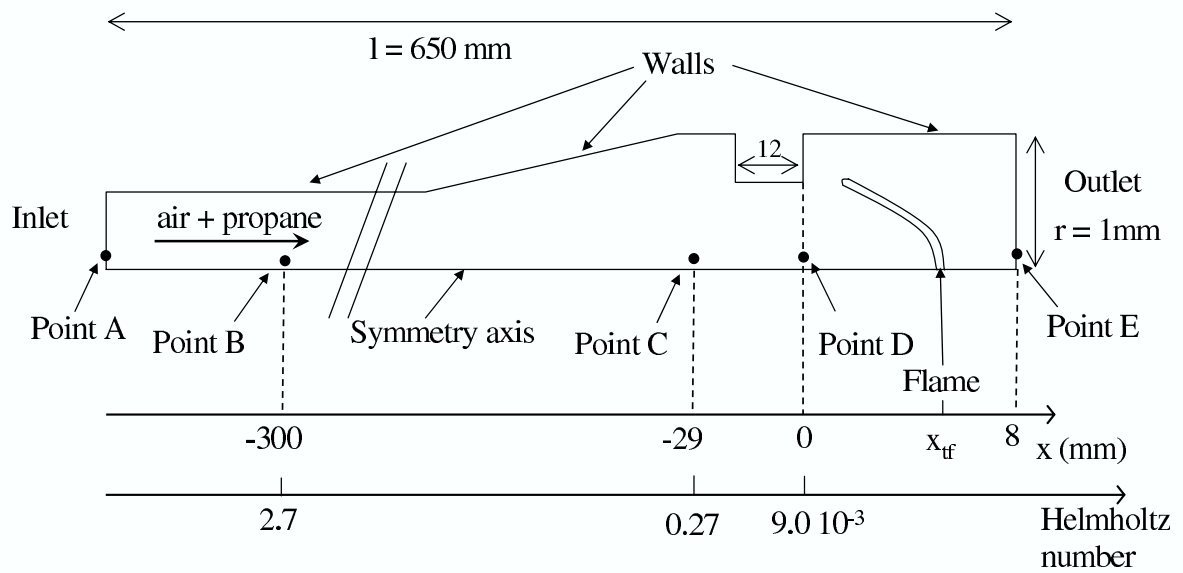


FIG. 5.5 – Configuration for numerical simulations of the isolated laminar propane air flame.

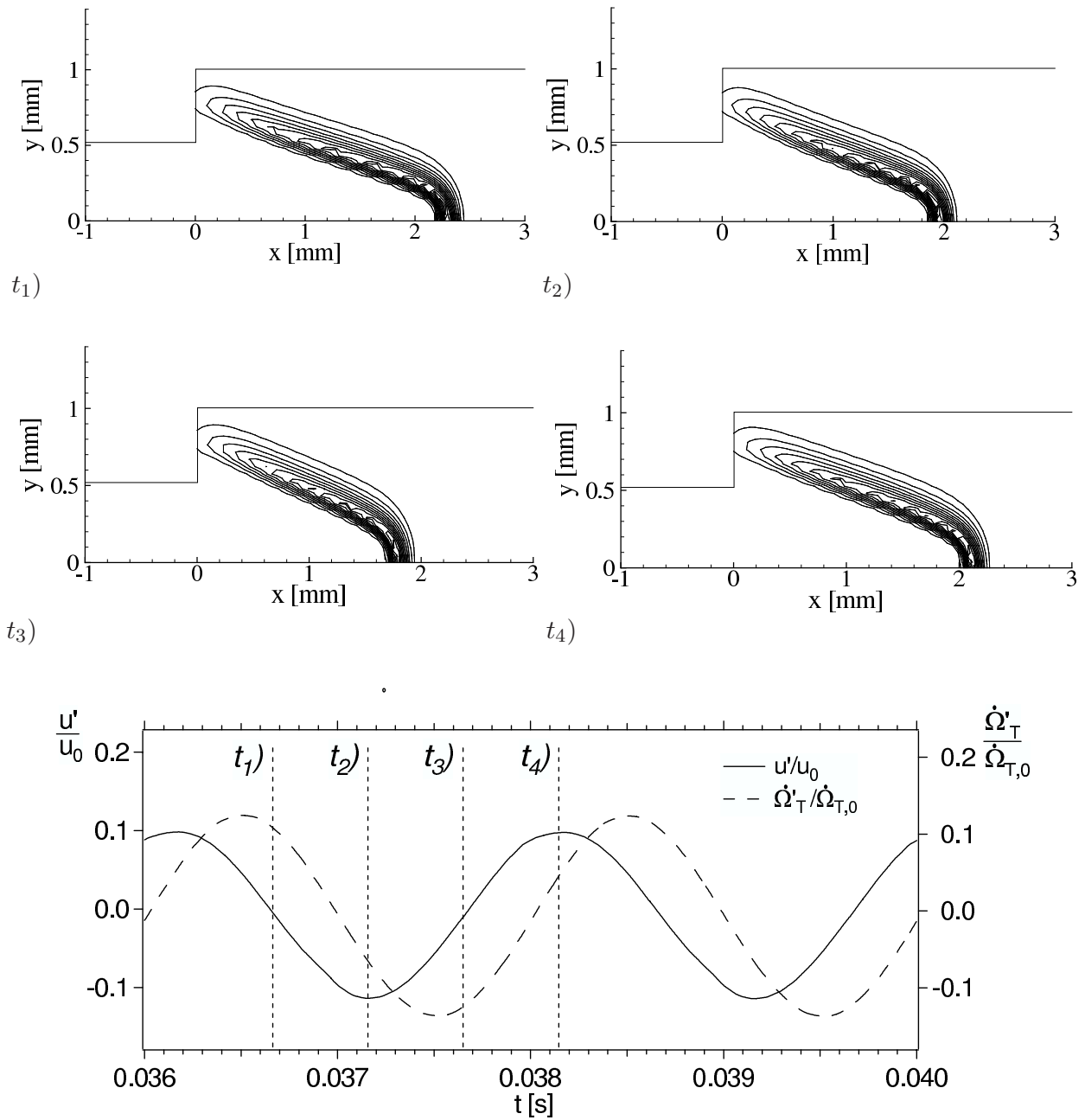


FIG. 5.6 – t_1) to t_4): Snapshots of heat release contours at different times in the flame pulsation cycle (500 Hz). Underneath: unsteady velocity (u'/u_0) at the chamber inlet and heat release ($\dot{Q}'_T/\dot{Q}_{T,0}$) signals with corresponding snapshots' times.

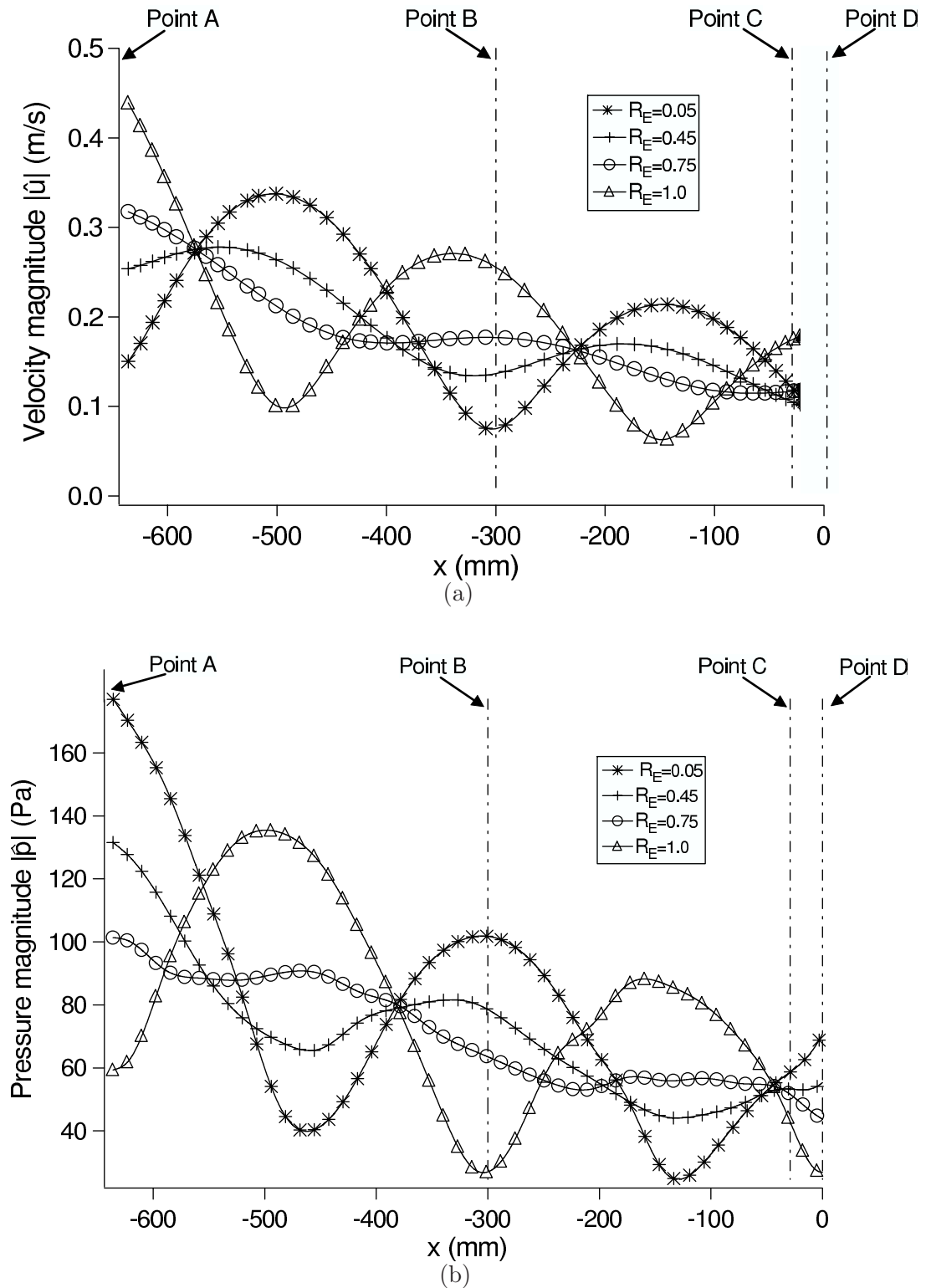
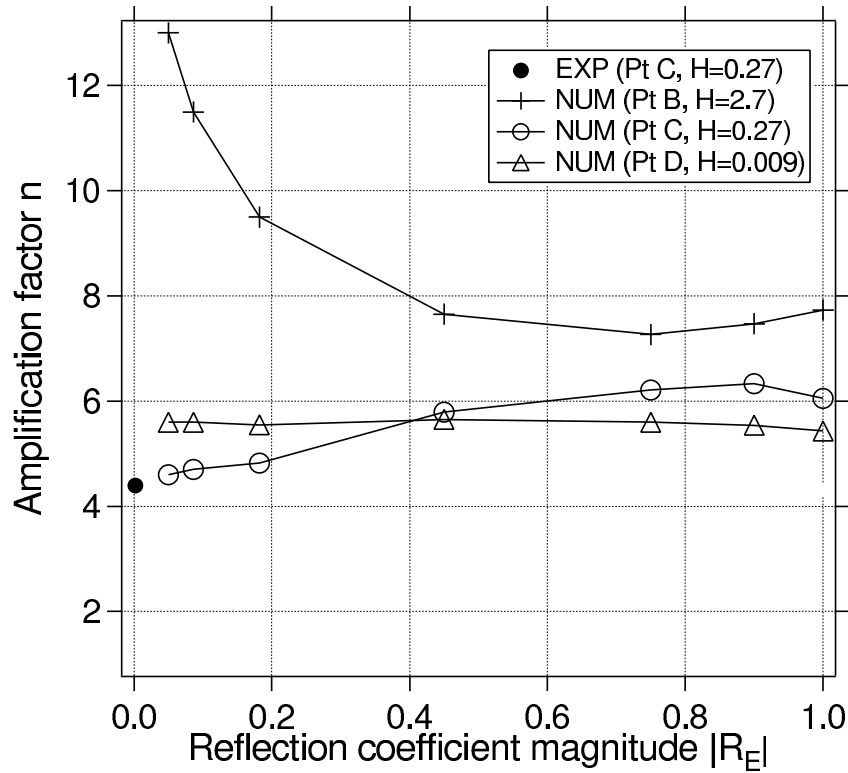
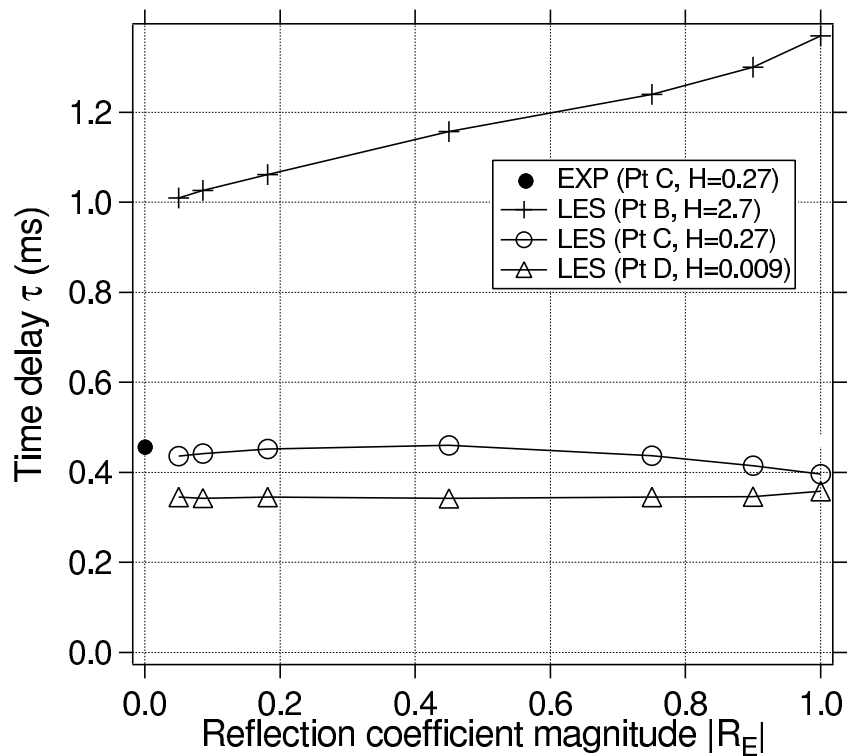


FIG. 5.7 – Structure of the 500 Hz mode in the upstream duct ($x < 0$ mm) for various reflection coefficients at the outlet R_E (point E): (a) absolute value of the velocity amplitude, (b) absolute value of the pressure amplitude.



(a)



(b)

FIG. 5.8 – Flame transfer function for the $n - \tau$ model versus the outlet reflection coefficient R_E (point E): (a) Amplification factor n , (b) Time delay τ . The experimental results were obtained with perfectly

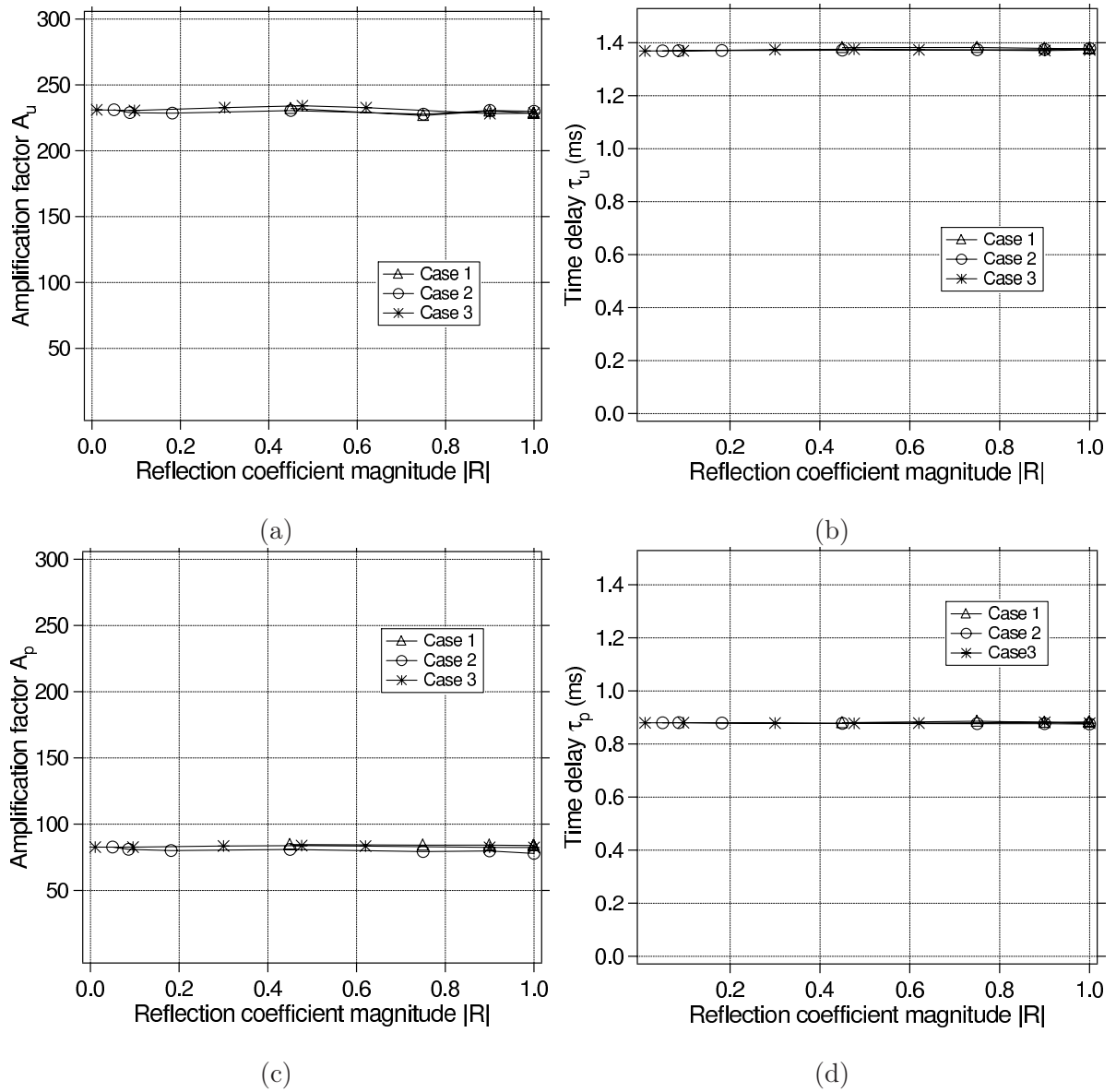


FIG. 5.9 – Flame transfer function for the extended $n - \tau$ model as a function of the outlet reflection coefficient R_E for cases 1 and 2 and of the inlet reflection coefficient R_A for case 3. The velocity and pressure fluctuations are evaluated at point B (300 mm upstream of the chamber). The forcing frequency is 500 Hz.

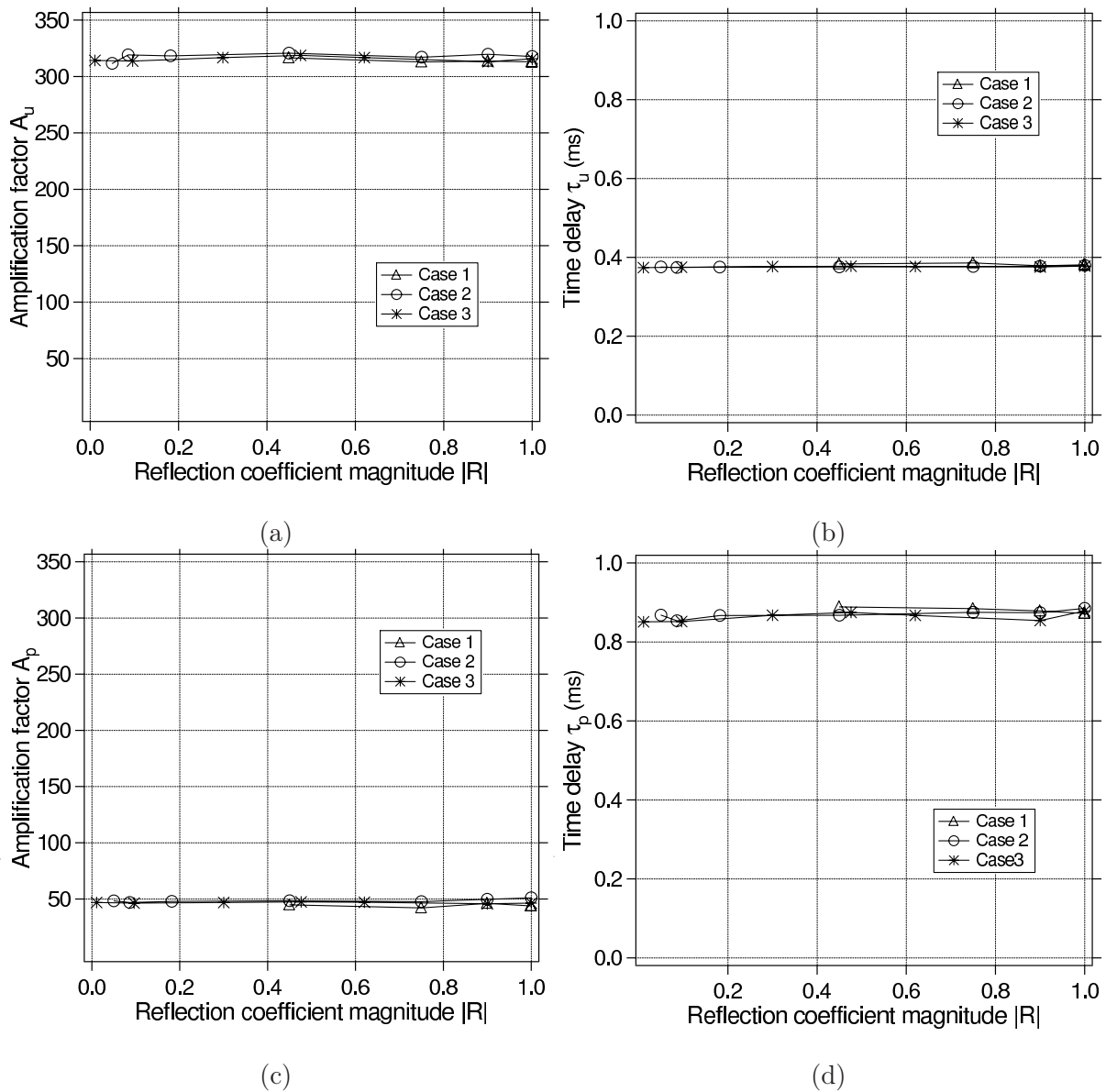


FIG. 5.10 – Flame transfer function for the extended $n - \tau$ model as a function of the outlet reflection coefficient R_E for cases 1 and 2 and of the inlet reflection coefficient R_A for case 3. The velocity and pressure fluctuations are evaluated at point C (29 mm upstream of the chamber). The forcing frequency is 500 Hz.

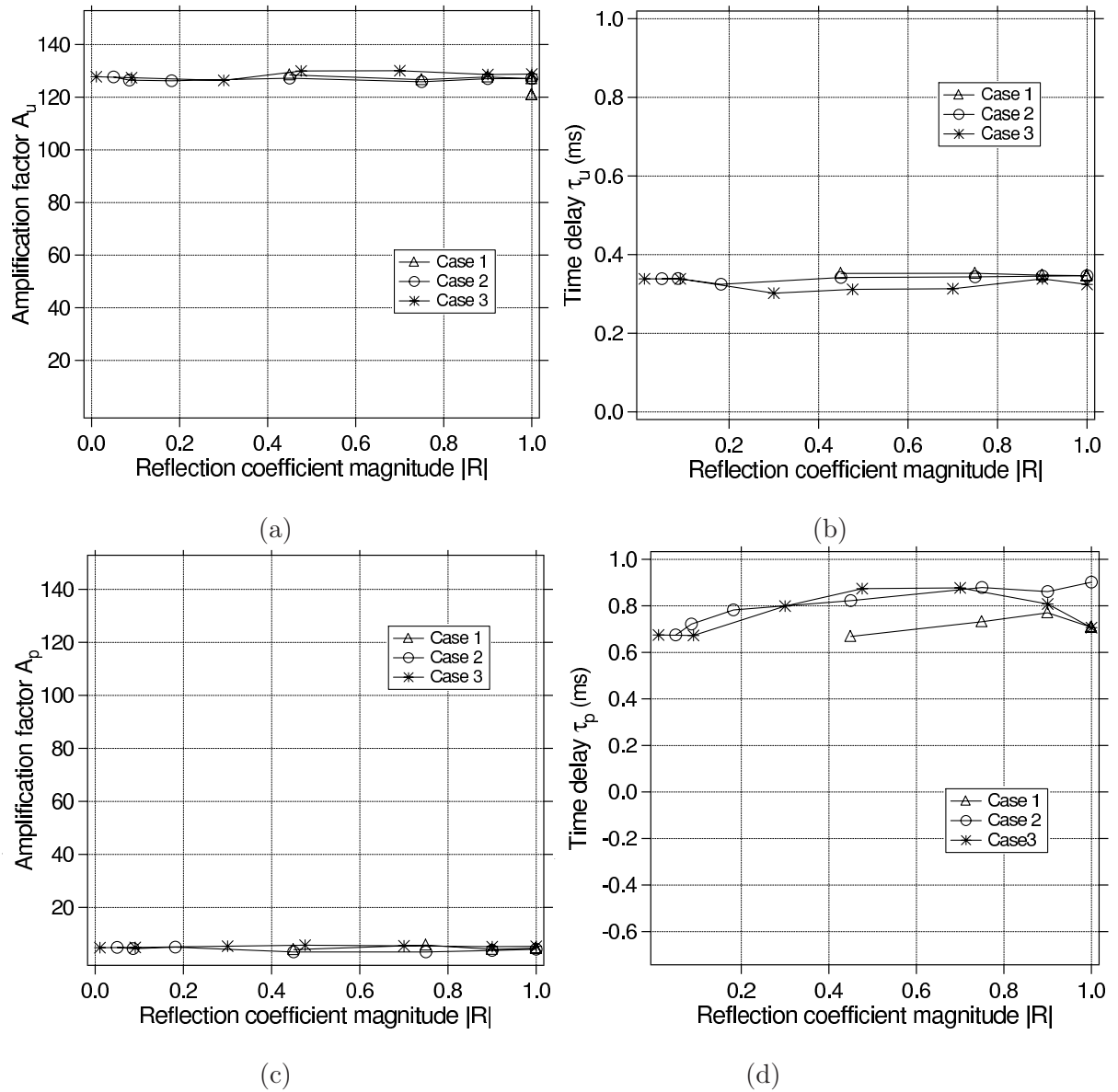


FIG. 5.11 – Flame transfer function for the extended $n - \tau$ model as a function of the outlet reflection coefficient R_E for cases 1 and 2 and of the inlet reflection coefficient R_A for case 3. The velocity and pressure fluctuations are evaluated at point D (inlet plane of the chamber). The forcing frequency is 500

Hz.

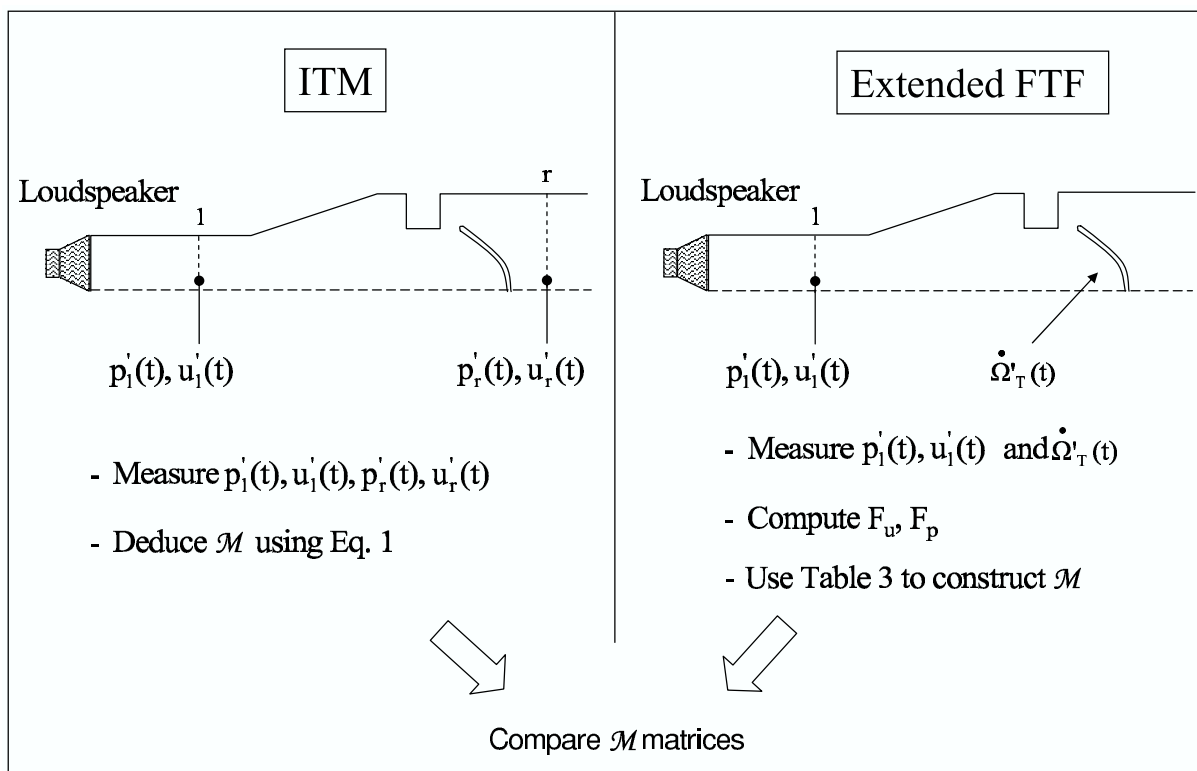


FIG. 5.12 – Comparison of the transfer matrices \mathcal{M} obtained by the ITM approaches and extended FTF models.

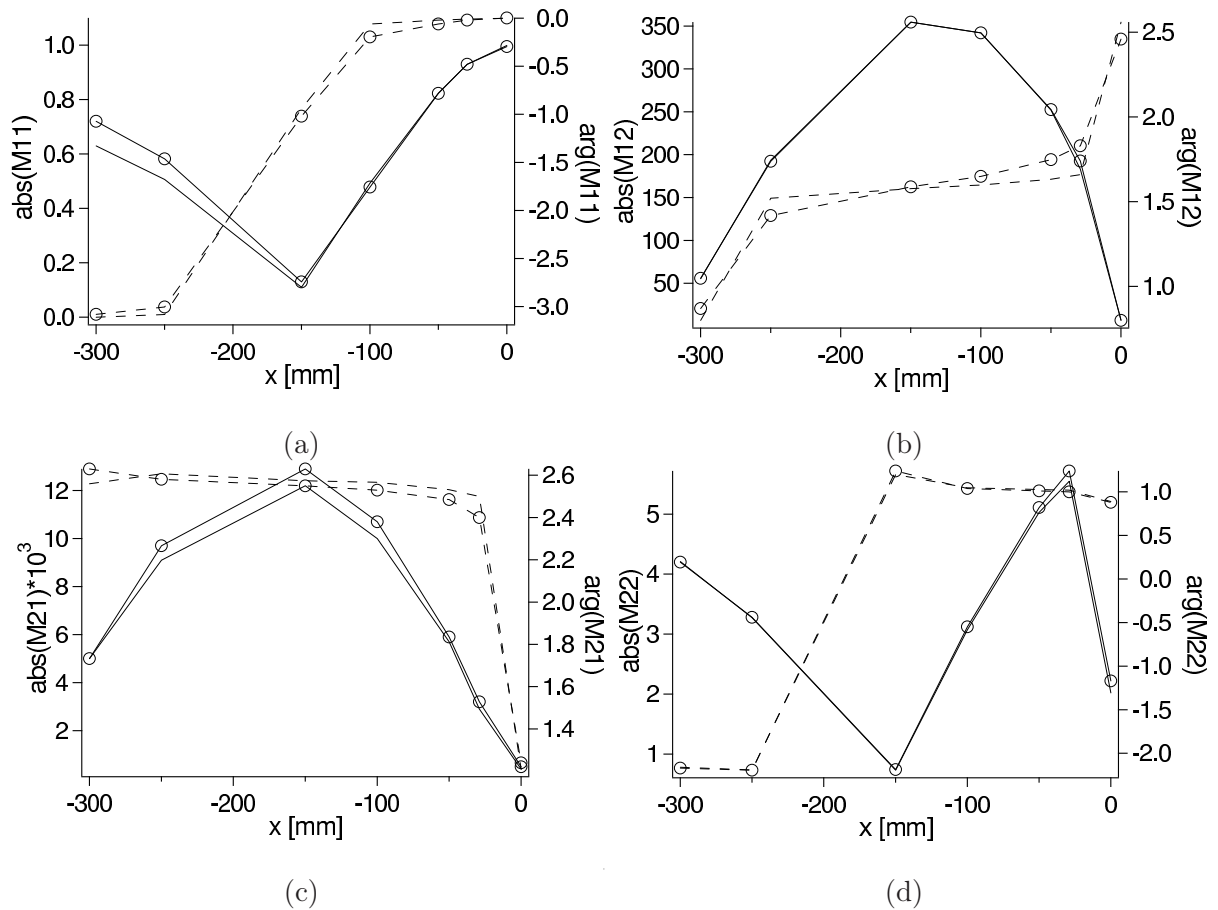


FIG. 5.13 – The four coefficients of the transfer matrix \mathcal{M} of the burner for different positions of the reference point x_a . Solid line: absolute value; dashed line: phase [rad]. Line and symbols: ITM; line: extended FTF (using the $n - \tau$ model).

Troisième partie

Application à une configuration
complète de laboratoire, le brûleur
ICLEAC

Chapitre 6

Installation expérimentale, configuration

6.1 Contexte de l'étude

Cette partie est consacrée à la validation des modèles LES de turbulence et de combustion (Partie I), dans le cadre d'une configuration académique non prémélangée. Elle représente un premier cas d'étude pour évaluer les capacités de la LES sur des maillages de grandes tailles. Cette évaluation est réalisée grâce à des comparaisons avec des résultats expérimentaux provenant d'une étude menée au laboratoire CNRS de combustion et d'énergétique de Chatenay-Malabry (EM2C). La configuration a été développée pour valider les simulations numériques d'une flamme détachée en régime partiellement prémélangé. Deux cas sont présentés: dans le premier, les débits sont constants, dans le second, une excitation acoustique est imposée pour moduler le débit. Ce dernier cas permet de calculer la fonction de transfert et d'appliquer les méthodes décrites dans la Partie II.

6.2 Installation expérimentale

6.2.1 Présentation de la géométrie

La configuration a été développée dans le but de reproduire les principales caractéristiques d'une chambre de combustion aéronautique [194]. Les critères choisis pour guider la conception du brûleur sont les suivants:

- C1** le fuel et l'air sont injectés séparément afin de réaliser dans la chambre un milieu partiellement prémélangé.
- C2** Pour observer un régime de flamme détachée, celle-ci doit être stabilisée par une zone de recirculation contenant des gaz chauds.
- C3** La géométrie doit être simple pour faciliter la réalisation des diagnostics optiques, dans le cas de l'étude expérimentale.
- C4** La géométrie doit permettre l'utilisation de maillages réguliers dans la simulation numérique.

La géométrie obtenue est représentative d'une coupe d'un injecteur coaxial de propulseurs aéronautiques. Les réactifs sont l'air et le propane. La combustion se fait à pression atmosphérique sous préchauffage; Les critères *C1* à *C4* sont respectés en utilisant les propriétés suivantes:

- P1** Le propane est injecté par l'intermédiaire de deux fentes placées dans le canal d'amené d'air, afin de réaliser dans la chambre un milieu partiellement prémélangé (Fig 6.1).
- P2** Le brûleur présente un élargissement brusque au niveau du plan d'injection des réactifs

permettant la stabilisation de la flamme.

P3 La configuration 2D facilite les diagnostics optiques (PIV, PLIF) pour des visualisations expérimentales dans le plan de l'écoulement et dans le plan transverse (Fig. 6.2) .

P4 La simplicité de la géométrie: parois planes, conduites d'amenées des réactifs à sections constantes, chambre de combustion parallélépipédique permet d'utiliser des maillages réguliers pour le calcul numérique.

La Fig. 6.2 montre la chambre de combustion munies des conduites permettant l'injection de propane dans l'écoulement d'air. Les injecteurs de propane intègrent un compartiment de billes de verre qui génère la perte de charge nécessaire à l'homogénéisation de l'écoulement.

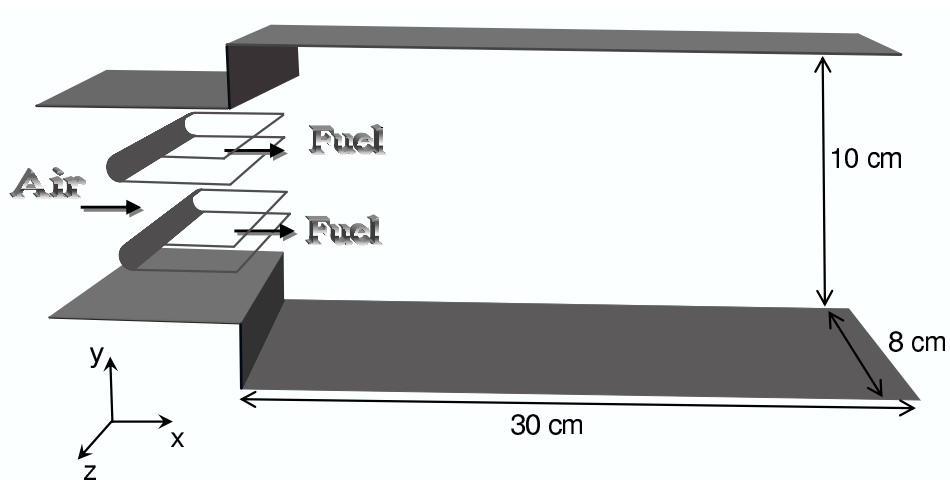


FIG. 6.1 – Vue tridimensionnelle du brûleur.

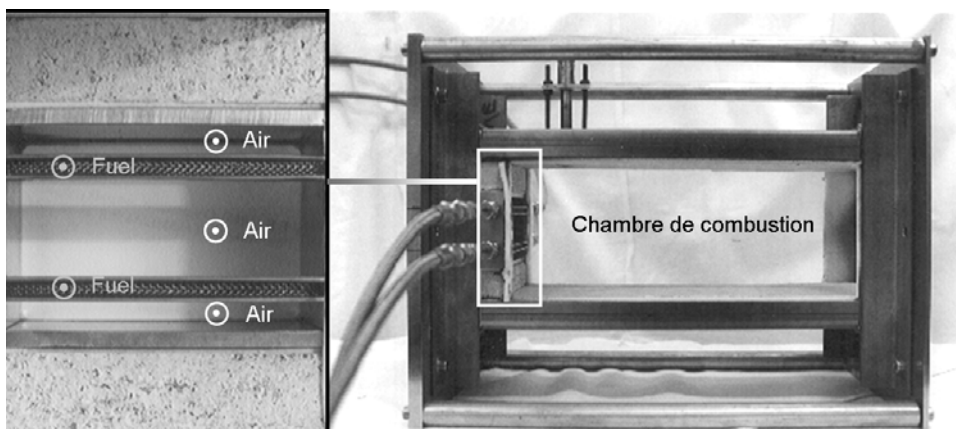


FIG. 6.2 – Photo de la chambre de combustion. A gauche: vue de la sortie des injecteurs, à droite: vue latérale de la chambre de combustion équipée des injecteurs de fuel et du canal d'amené d'air. Les parois transparentes sont en quartz.

6.2.2 Caractéristiques de la chambre de combustion

Le brûleur est constitué d'une chambre de combustion de 30 cm de long, de 10 cm de haut et 8 cm de profondeur. L'injection d'air se fait par un canal de 5 cm de haut, 20 cm de longueur et 8 cm de profondeur (Fig. 6.2.2). L'échappement est libre, sans convergent ni divergent. Divers éléments ont été inclus dans l'installation expérimentale pour réaliser les mesures:

- Afin de visualiser la flamme et de permettre l'accès optique des nappes laser dans la chambre, celle-ci est munie de hublots en quartz synthétique sur les parois verticales. Les autres parois sont en béton réfractaire isolant. Des fentes dans les parois horizontales permettent d'introduire des nappes lasers.
- Différents capteurs sont placés dans l'installation (microphones, fils chauds) pour mesurer les fluctuations de pression et de vitesse dans l'écoulement.
- Afin d'étudier la réponse de la flamme soumise à une perturbation acoustique, deux chambres de compression sont placées sur la conduite d'air (Fig.6.4). Celles-ci génèrent des ondes qui peuvent être considérées comme planes lorsqu'elles arrivent au niveau du plan d'injection.

6.2.3 Données expérimentales disponibles

La validation des calculs LES repose sur des mesures expérimentales fiables des champs instantanés et moyens scalaires et des trois composantes de la vitesse. Différentes techniques peuvent être mises en oeuvre [44,91,95,191]. Dans cette étude, l'objectif est de décrire le comportement de la flamme dans un brûleur partiellement prémélangé pour valider la simulation aux grandes échelles en utilisant différents diagnostics:

- Dans un milieu non prémélangé, la description simultanée de la dynamique du mélange et de la position de la flamme peut être caractérisée par la Fluorescence induite par laser simultanée ou PLIF (pour planar laser induced fluorescence) de l'acétone et du radical OH. La PLIF de la vapeur d'acétone ajoutée comme traçeur dans l'écoulement du combustible et sur le radical OH est utilisée pour visualiser à la fois le mélange du propane dans l'air, les zones de réaction et les gaz brûlés.
- La PLIF sur CH donne une information directe sur la position moyenne de la flamme.
- Les analyses de gaz réalisées suivant différents plans de coupe permettent de mesurer les concentrations de C_3H_8 , O_2 , CO_2 et CO . Les profils de fractions massiques ainsi obtenus donnent une estimation de la longueur de la flamme.
- Les profils de vitesse moyenne extraits des mesures PIV (particule image velocimetry) permettent de valider le champ de vitesse axiale obtenu avec la LES à la sortie des injecteurs et dans les gaz frais.

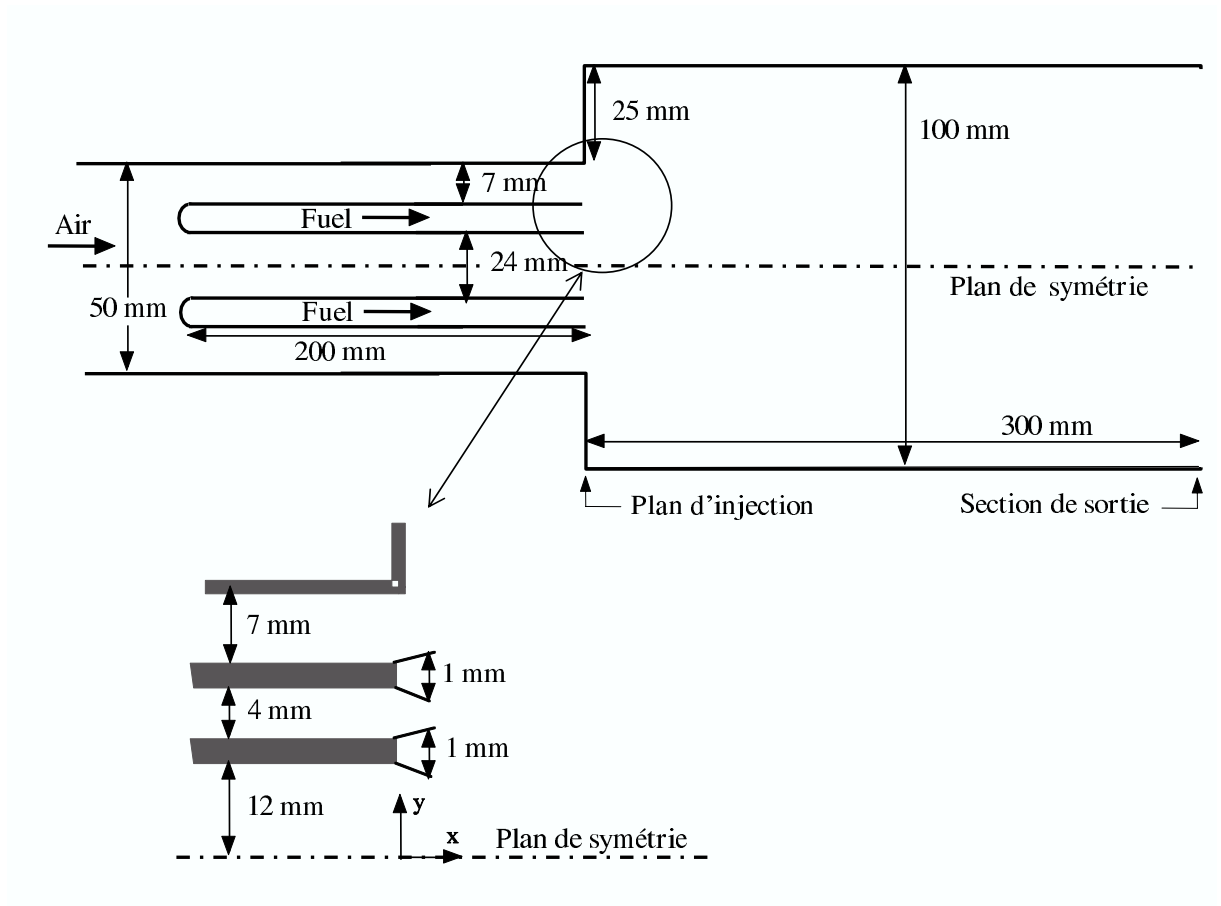


FIG. 6.3 – Dimensions du dispositif expérimental. Coupe selon le plan de symétrie vertical. L'axe x correspond à la direction de l'écoulement moyen, l'axe y est la hauteur et l'axe z est la profondeur du brûleur.

- Sous excitation acoustique, il est intéressant de connaître l'amplitude résultante des fluctuations de vitesse dans l'écoulement quantifié à l'aide d'une PIV dans la chambre de combustion.
- Les moyennes de phase permettent de mesurer la réponse de la flamme à une perturbation acoustique en utilisant à la fois la PIV et la PLIF sur OH.

Visualisation par émission de radicaux à l'aide de la PLIF

Ce moyen de diagnostic est basé sur les propriétés radiatives d'une espèce excitée. La Fluorescence induite par laser (PLIF) est utilisée pour exciter la transition des radicaux afin de collecter le rayonnement correspondant à la transition. Dans la zone de réaction, il existe des radicaux déjà excités qui lors de la transition vers un état d'énergie inférieur vont émettre un rayonnement caractéristique de l'espèce et de la transition considérée. Les espèces détectées dans ce cas sont les radicaux CH et OH (notés CH^+ et OH^+ dans leur état excité). Lorsque ces radicaux se trouvent dans leur état fondamental et qu'ils transitionnent sous l'effet du laser, leur présence

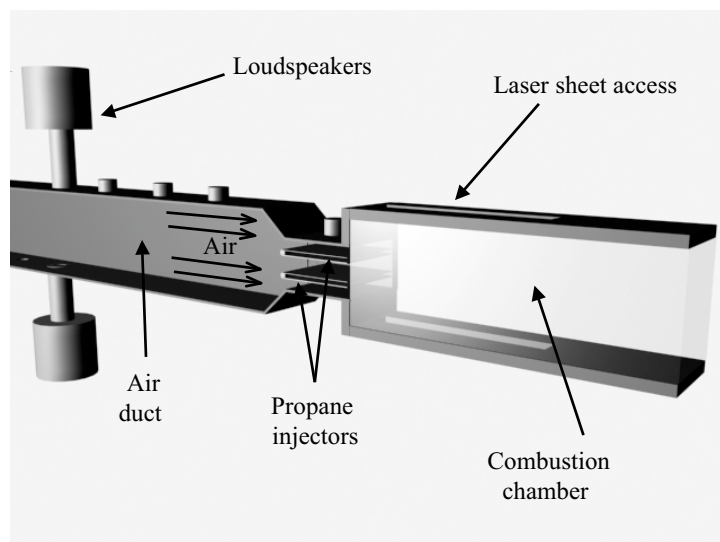


FIG. 6.4 – Chambre de combustion et son dispositif d'excitation acoustique.

n'est pas forcément directement corrélée à la zone de réaction. En effet, le radical CH est présent uniquement dans la zone de décomposition des réactifs. Cette espèce est donc un bon traceur de la zone de réaction. Ce n'est pas le cas du radical OH qui est présent dans la zone de réaction mais aussi dans les gaz brûlés. La détection de OH est donc spatialement corrélée avec la zone de réaction et avec les produits de la réaction. Pour s'affranchir de ce problème, la PLIF de OH est couplée à la détection par fluorescence de l'acétone introduite dans le fuel. L'acétone est ensemencé dans le propane à l'état de vapeur et se décompose sous l'effet de la chaleur ($T > 1000K$). Ainsi la PLIF de l'acétone permet de suivre le mélange dans les gaz frais et peut conduire à la mesure quantitative des fractions massiques. La superposition avec la fluorescence de OH permet alors de définir les contours de la zone réactive.

La visualisation de l'émission spontanée de CH est obtenue grâce à une caméra permettant d'acquérir 50 images par seconde. La faible résolution temporelle (50 Hz) ne permet pas un suivant temporel et le signal recueilli est intégré spatialement selon la profondeur de la chambre. Mais la chimiluminescence de CH détecte directement la zone réactive.

Pour la fluorescence simultanée de OH et de l'acétone, un système de lentilles et de miroirs permet d'obtenir une nappe laser (longitudinales ou transverses) à partir du faisceau laser (Fig. 6.5). Les signaux enregistrés à l'aide de caméras de résolution temporelle 50 Hz, permettent de visualiser le mélange et les régions chaudes selon des coupes longitudinales et transverses dans la chambre de combustion.

Des descriptions détaillées de cette technique peuvent être trouvées dans [30,52] pour la PLIF de OH, dans [108,124,179] pour la PLIF de l'acétone.

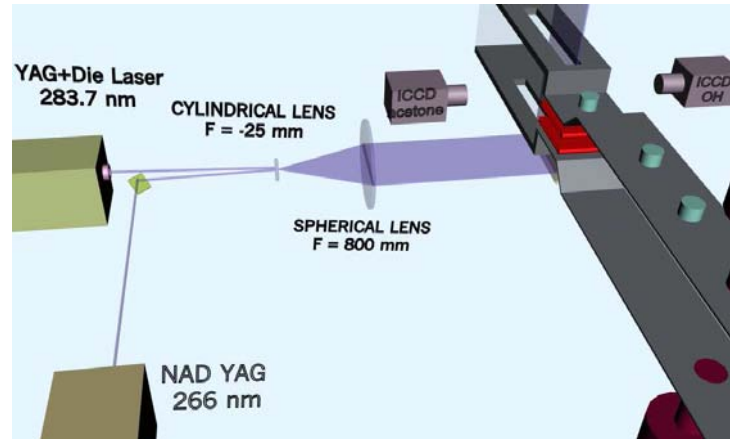


FIG. 6.5 – Dispositif expérimental pour la PLIF du radical OH et de l'acétone.

Mesure de vitesse par PIV

La PIV (Particle Image Velocimetry) est une technique permettant de mesurer les champs de vitesse dans les écoulements. L'écoulement d'air estensemencé de particules d'huile qui s'évaporent à la température $T^* \approx 720K$. Cette propriété conduit à la mesure des vitesses conditionnées par les gaz frais, qui est liée à la position de la flamme. La vitesse axiale moyenne conditionnée $\overline{u^*}$ est définie par:

$$\overline{u^*} = \left(\overline{u | T(x_i, t) \leq T^*} \right) \quad \text{avec } T^* = 720 K \quad (6.1)$$

Les champs de vitesse sont obtenus par l'analyse du déplacement des particules enregistrées entre deux évènements successifs. Ces particules vont diffuser la lumière générée par deux nappes lasers, dont les impulsions sont décalées dans le temps. Le déplacement de la particule entre ces deux instants donne sa direction et sa vitesse. Dans les zones proches des injecteurs, le nombre de particules est faible car l'ensemencement n'est réalisé, pour des questions pratiques, que dans l'écoulement d'air. Dans ces zones, la PIV n'est pas fiable et ne peut être prise en compte.

L'analyse de gaz

L'analyse de gaz est réalisée par spectrométrie infrarouge. Cette technique consiste à prélever un échantillon de gaz dans la chambre de combustion à l'aide d'une sonde. L'échantillon est ensuite conduit vers l'analyseur dans laquelle le gaz est soumis à un rayonnement infrarouge et un spectromètre. Cette technique de mesure utilise les propriétés spectroscopiques des espèces. Les mesures de fractions massiques issus de cette technique doivent être utilisées avec précaution:

- Les fractions molaires mesurées correspondent à des échantillons sur extrait sec. Il faut donc retrouver les fractions molaires et massiques correspondants à l'échantillon réel. La résolution du système d'équations reliant les concentrations de l'extrait sec à celles de l'échantillon réel conduit à des erreurs significatives [194].
- Lorsque la concentration d'une espèce devient trop importante, des déviations peuvent apparaître dans la relation reliant la transmittance à la concentration.
- Les bibliothèques spectroscopiques sont calibrées jusqu'à une teneur de 5% en propane, la mesure des concentrations dans les écoulements riches en combustible est donc biaisée.

Des détails sur ces techniques et le dispositif expérimental utilisés dans l'étude du brûleur sont données dans le mémoire de Varoquie [194].

Mesure de la fonction de transfert de la flamme

Hurle [73] a montré que pour une richesse donnée, l'émission du radical CH est proportionnelle au taux de dégagement de chaleur global ($\dot{\Omega}_T$). Pour un milieu à richesse variable, le lien entre CH et le dégagement de chaleur n'est pas simple. Cependant, en normalisant le signal d'émission par sa valeur à la stœchiométrie et en supposant que la fonction reliant CH à $\dot{\Omega}_T$ est bijective, l'erreur reste petite. En fait, pour de faibles variations de la richesse autour de la stœchiométrie ($0.8 < \phi < 1.2$), cette erreur n'excède pas 15 % et dans ce cas, le choix de CH est pertinent pour mesurer $\dot{\Omega}_T$. L'émission du radical CH est mesuré par tranche verticale d'épaisseur 1 cm suivant la direction de l'écoulement (Fig.6.6), autorisant ainsi une analyse spatiale de la fonction de transfert de la flamme. Le taux de dégagement de chaleur local estimé dans l'expérience, est une mesure intégrée spatialement sur chaque tranche. Le lien entre le signal du photomultiplicateur S et le taux de dégagement de chaleur $\dot{\Omega}_T$ est possible en utilisant les hypothèses suivantes:

- Le propane brûle de façon homogène dans la chambre de combustion (i.e. la même quantité de propane brûle dans chaque tranche). Cette hypothèse est grossière mais l'émission de la fluctuation rms sur les 30 tranches ($N = 30$) n'excède pas 20 % du signal moyen.
- Les variations non linéaires entre l'émission du radical CH et le dégagement de chaleur sont négligées.

Ainsi, $\dot{\Omega}_T$ est relié au signal S d'émission de CH par la relation:

$$\dot{\Omega}_T(x,t) = S(x,t)/\alpha \quad \text{avec} \quad \alpha = \frac{\dot{m}_{C_3H_8}}{N} Q \quad (6.2)$$

où N est le nombre de tranches verticales, $\dot{m}_{C_3H_8}$ est le débit massique de propane et Q est la chaleur de la réaction propane/air. Finalement, cette valeur de $\dot{\Omega}_T$ est utilisée pour calculer les

coefficients n et τ . La vitesse de référence est mesurée à l'aide d'un fil chaud placé à 17 mm en amont du plan d'injection (Point P_1 sur la Fig. 6.6).

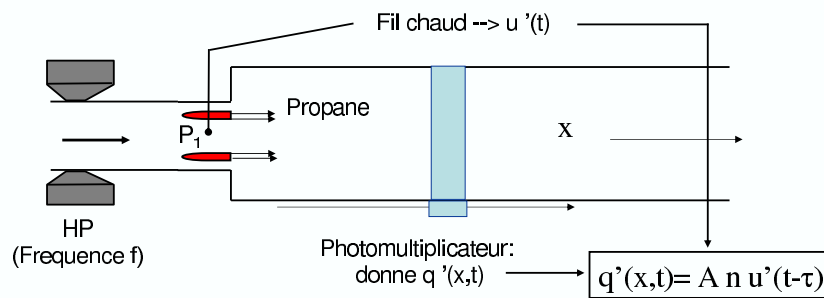


FIG. 6.6 – Montage pour la mesure de la réponse locale de la flamme à l'excitation acoustique.

6.2.4 Caractérisation expérimentale des régimes de combustion

Dans beaucoup d'études en diffusion la flamme est stabilisée par une injection de gaz chauds [116,147] ou par une flamme pilote [173]. Dans le cas de la configuration étudiée ici aucun dispositif particulier n'assure la stabilisation de la flamme. Elle se stabilise naturellement dans les zones où les réactifs sont réchauffés par les gaz chauds. Un tel mécanisme est rendu possible par les phénomènes hydrodynamiques (zones de recirculation, détachements tourbillonnaires) qui assurent le transport des réactifs vers les zones chaudes. Le brûleur présente essentiellement deux types de fonctionnement, qui sont très proches des régimes observés dans les turbines à gaz:

- Pour de faibles puissances (faibles débits de fuel et d'air), la flamme est stabilisée près des lèvres des injecteurs. C'est le régime de flamme accrochée.
- Quand la puissance augmente, la flamme ne peut plus résister aux vitesses élevées près des injecteurs. On observe alors une flamme décrochée (ou liftée) stabilisée derrière les zones de recirculation. Si la vitesse dans l'écoulement d'air augmente encore, la flamme est complètement soufflée (extinction).

Ces régimes sont résumés sur la carte de la Fig. 6.7.

L'objectif de cette étude étant de reproduire les processus de mélange et de stabilisation de la flamme turbulente partiellement prémélangée derrière les zones de recirculation, on ne s'intéresse qu'au régime de flamme décrochée. Le point de fonctionnement est noté B sur la Fig. 6.7. Une description du régime de flamme accrochée et de la transition entre les deux régimes est donnée dans le mémoire de thèse de Varoquie [194].

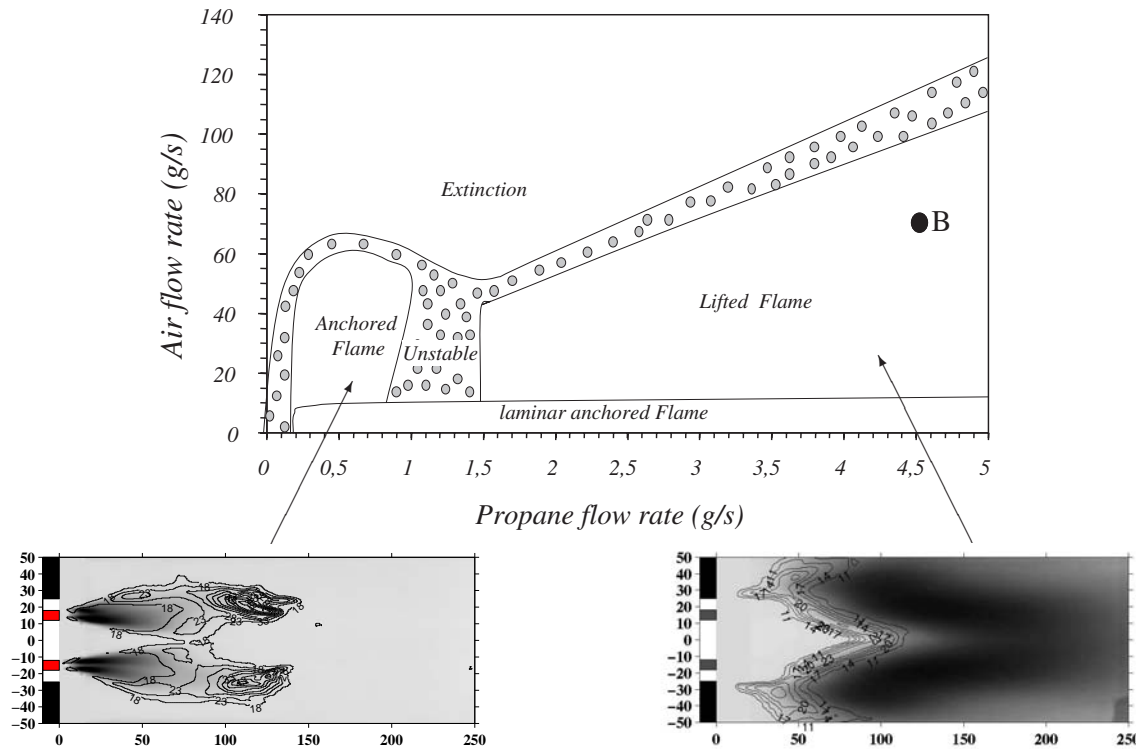


FIG. 6.7 – Carte des régimes (données expérimentales). Champs moyens des flammes obtenus pour chacun des régimes à l'aide de l'émission spontanée de CH^+ .

Le point de fonctionnement B étudié (Fig. 6.7) correspond à un débit massique d'air de $\dot{m}_{air} = 70$ g/s et un débit massique de fuel de $\dot{m}_F = 4.5$ g/s. La richesse globale ϕ_g vaut:

$$\phi_g = s \frac{\dot{m}_F}{\dot{m}_O} = s \frac{\dot{m}_F}{Y_O^0 \dot{m}_{air}} = 3.63 * \frac{\dot{m}_F}{0.233 \dot{m}_{air}} \approx 1 \quad (6.3)$$

Le nombre de Reynolds est représentatif du niveau de turbulence dans l'écoulement. Pour le régime considéré Re est estimé par $Re = U_d h / \nu \approx 56,000$, où U_d est la vitesse débitante et h est la hauteur du brûleur. L'écoulement est donc fortement turbulent.

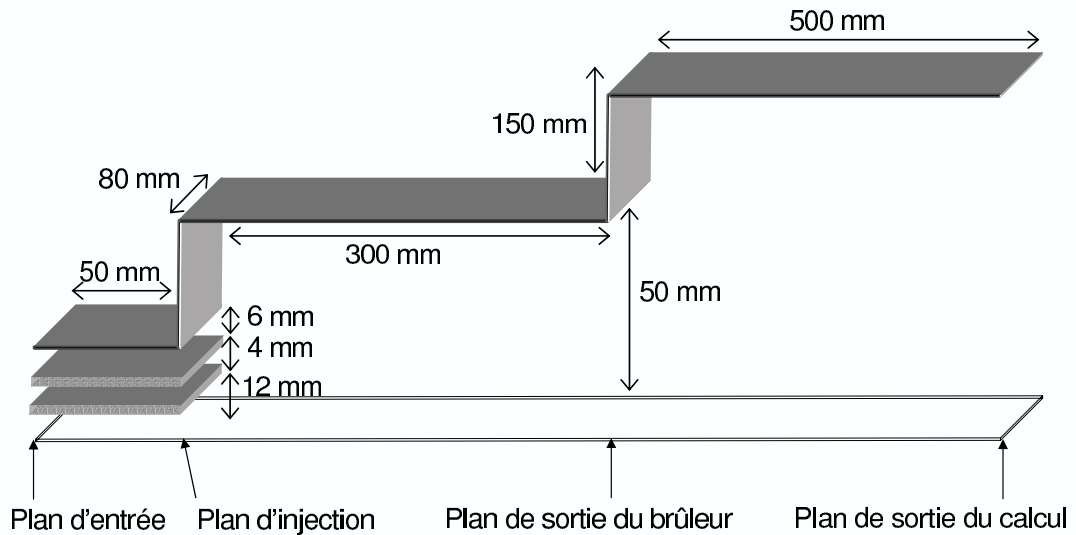


FIG. 6.8 – Domaine de calcul.

6.3 Description des calculs numériques

6.3.1 Domaine de calcul

La simulation numérique en deux dimensions du brûleur a été réalisée au cours du travail de thèse de Légier [99] dans une version antérieure du code (C_p constant, une chimie simple à 1 seule réaction). Le domaine de calcul pour le cas 3D est similaire. Pour des raisons de coût de calcul, seule la moitié supérieure du brûleur est calculée. Cette simplification est justifiée par les mesures expérimentales de champs moyens (PIV et PLIF) qui présentent une réelle symétrie par rapport au plan central horizontal. Le domaine de calcul commence 50 mm en amont du plan d'injection. Les profils de vitesse en entrée ont ainsi pu être calés sur les profils expérimentaux. Enfin, le domaine englobe une partie de l'atmosphère en sortie du brûleur pour éviter les interactions entre la flamme ou les tourbillons et les conditions limites de sortie.

La Fig. 6.9 présente les zones d'interrogation de l'expérience rapportés au domaine de calcul. Toutes les mesures sont réalisées dans le premier tiers de la chambre, excepté la mesure du champ d'émission de CH qui est obtenue sur toute la longueur de la chambre.

6.3.2 Les conditions aux limites

La méthode NSCBC [8,151] est utilisée pour avoir des conditions d'entrée et de sortie non réfléchissantes. Le calcul commence 50 mm en amont de la chambre. Aucune mesure expérimentale de la vitesse n'ayant été réalisée à cette abscisse, le profil de vitesse en entrée du domaine a

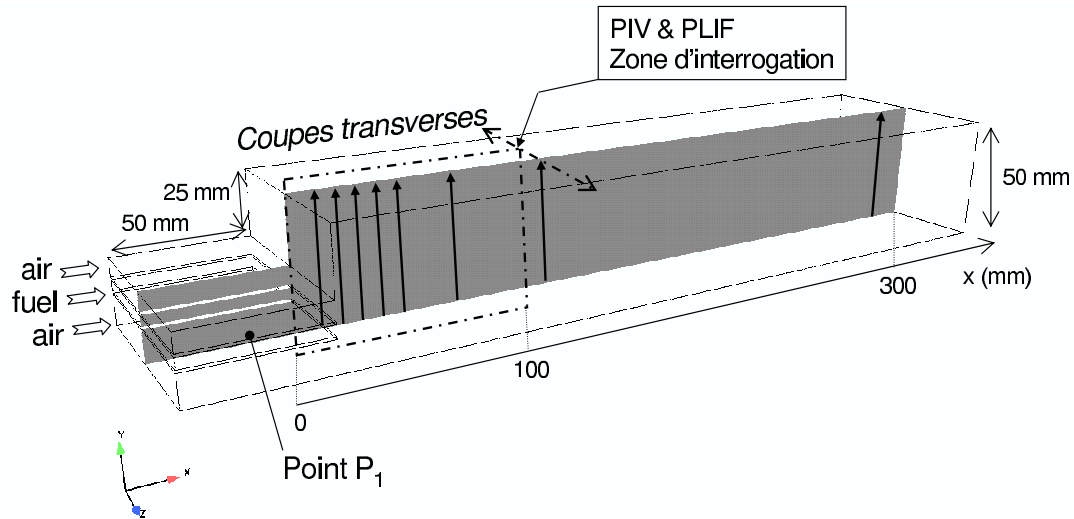


FIG. 6.9 – Coupe longitudinale du brûleur présentant les zones d'interrogation et profils verticaux pour comparaison avec l'expérience.

été validé en comparant le profil de vitesse axiale à 2 mm en aval du plan d'injection obtenu numériquement à celui obtenu expérimentalement (Fig. 6.11). La pression de référence en sortie est 101300 Pascal, et la température des gaz frais est 300 K. Les murs sont adiabatiques et non glissants. Les différentes conditions aux limites sont données sur la Fig. 6.10.

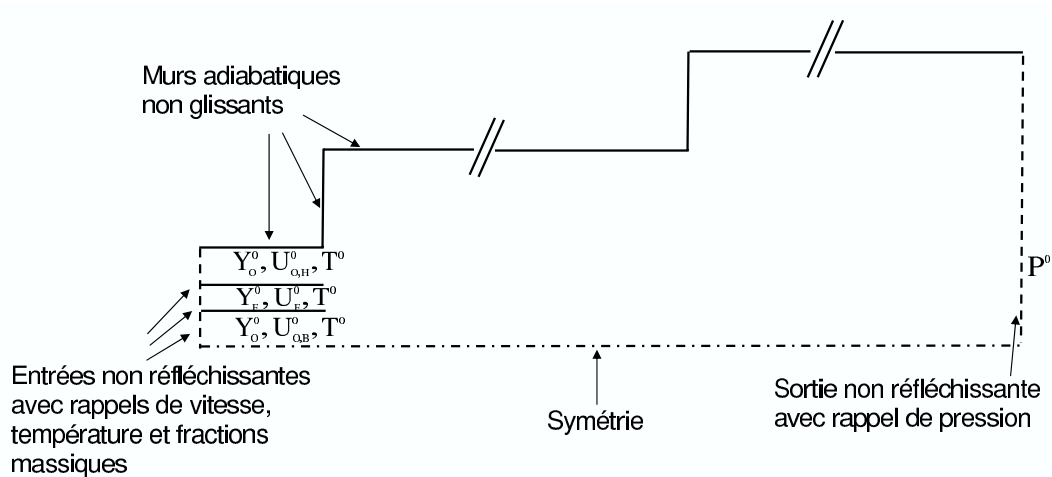


FIG. 6.10 – Conditions aux limites.

6.3.3 Le schéma cinétique

Le schéma cinétique utilisé pour cette étude est le schéma 2s-KT1 présenté dans la section 3.4.

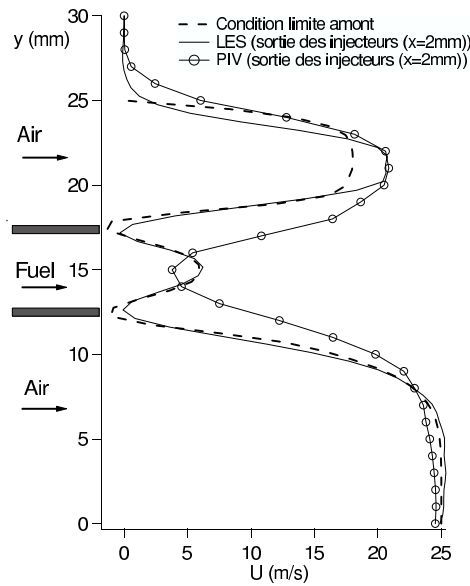


FIG. 6.11 – Profil de vitesse axiale à l'entrée de la chambre. La condition limite amont est située à $x = -50$ mm.

6.3.4 Le maillage

Le calcul du brûleur en 3 dimensions nécessite certaines conditions:

- les résultats expérimentaux montrent que la flamme est longue et s'étale sur toute la longueur de la chambre. D'autre part, les phénomènes fortement instationnaires génèrent des poches de gaz frais qui vont brûler au contact des gaz chauds n'importe où dans la chambre. Il est donc important d'utiliser un maillage régulier dans les injecteurs et la chambre de combustion.
- La zone des injecteurs est maillée plus finement pour prendre en compte les gradients présents à cet endroit. D'une part, des couches de mélange de fuel et d'oxydant se développent de par l'existence de gradients de fractions massiques, d'autre part la différence de vitesses entre la sortie des injecteurs et l'écoulement d'air crée une zone de cisaillement qu'il faut également capter.
- Le maillage utilisé par J.P. Légier [99] comporte 55,000 noeuds avec une taille caractéristique de maille $\Delta_x = \Delta_y = 0.57$ mm (Fig 6.12). La réalisation d'un maillage 3D avec la même résolution nécessiterait 7.7 millions de points, ce qui n'est absolument pas envisageable. Il faut donc réduire la taille du maillage tout en gardant une résolution suffisamment fine pour faire une bonne LES.

Le choix du maillage pour le calcul 3D est présenté dans la section 7.1.

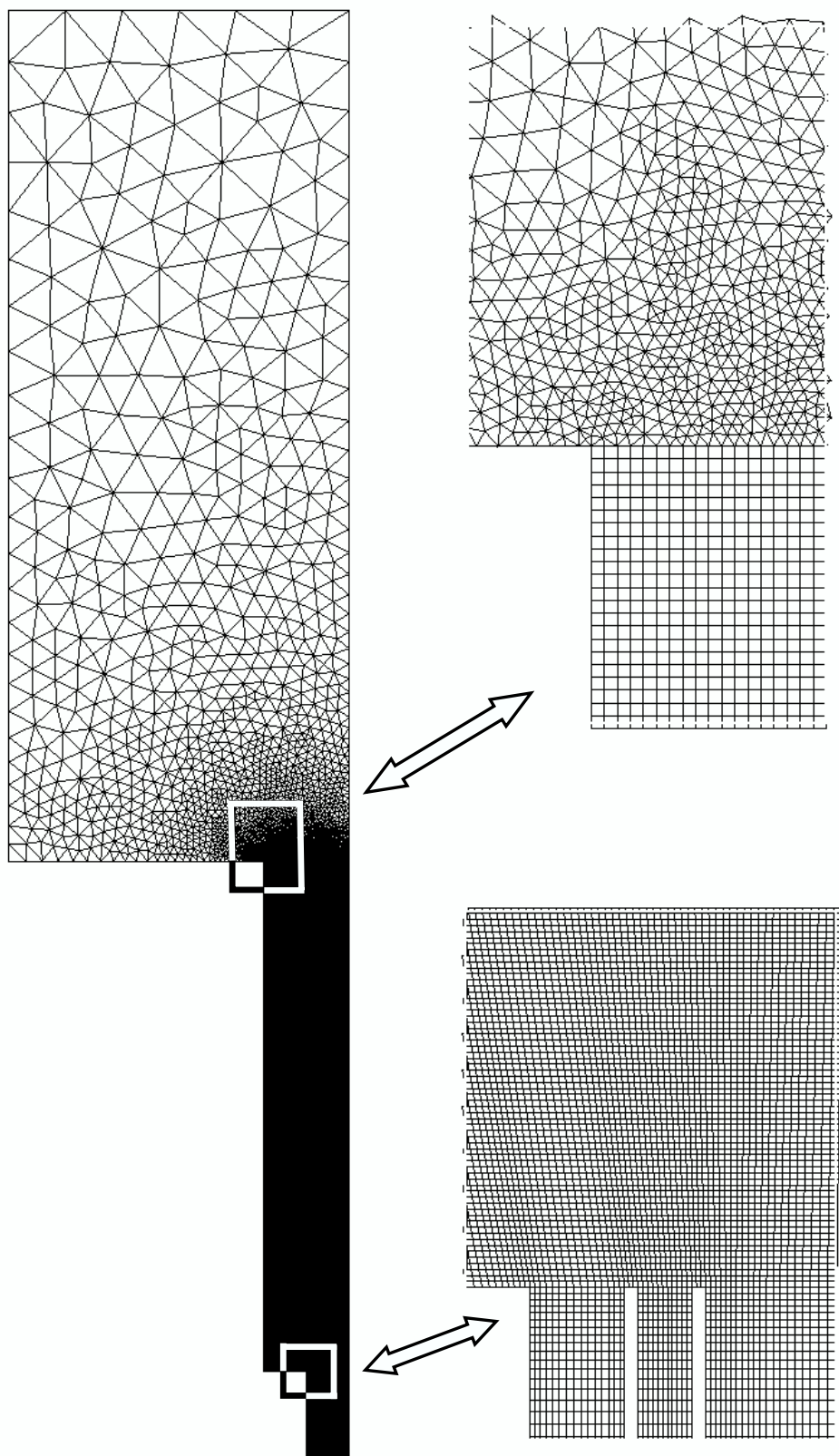


FIG. 6.12 – Vue du maillage 2D

6.3.5 Le calcul pulsé

L'écoulement d'air est pulsé à la fréquence 350 Hz (Fig. 6.13). La technique de forçage utilisée est la méthode IWM (Inlet Wave Modulation) [51,77]. Cette technique consiste à moduler l'onde acoustique entrante tout en laissant les ondes sortantes se propager hors du domaine sans réflexion. L'amplitude de la pulsation \hat{u}_0 imposée dans la section d'entrée correspond à 5 % de la vitesse moyenne $\overline{U(x_o)}$ afin de rester dans le domaine de l'acoustique linéaire. Dans le cas où aucune onde n'est réfléchie, la vitesse axiale imposée en entrée prend la forme:

$$U(x_o, t) = \overline{U(x_o)} + \hat{u}_0 \sin(\underbrace{2\pi ft}_{\phi_u}) \quad \text{with} \quad \begin{cases} u'_0 = 1.2 \text{ m.s}^{-1} \\ f = 350 \text{ Hz} \end{cases} \quad (6.4)$$

En pratique $U(x_o, t)$ ne suit pas (6.4) car les ondes remontent le tube d'injection. La phase ϕ_u est la phase de référence pour les comparaisons entre la LES et l'expérience. Les mesures PIV et PLIF sont calées sur le signal de pression à $x = x_0$ (Point P_1 sur la Fig. 6.9).

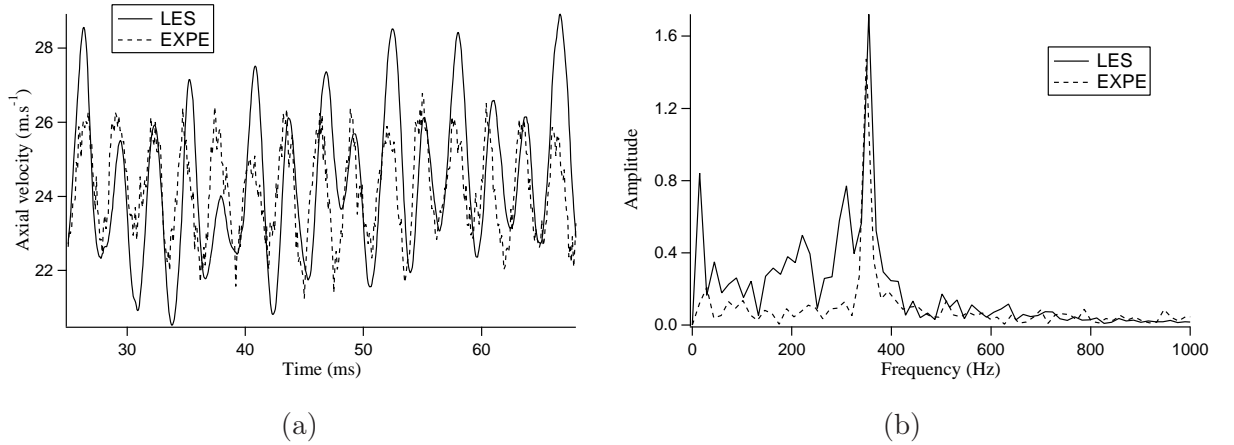


FIG. 6.13 – (a) Vitesse axiale mesurée au point P_1 (Fig. 6.9) et (b) sa transformée de Fourier .

6.4 Calcul de la fonction de transfert du brûleur

La Partie II décrit l'identification acoustique d'un brûleur lorsque la flamme est compacte. Dans le cas d'une flamme étendue, on fait l'hypothèse qu'elle peut être considérée comme une succession de flammes minces. Si cette hypothèse est valable, on assimile la chambre de combustion à une succession de tubes 1-D séparés par une interface réactive. La chambre est divisée en N tranches verticales de 1 cm d'épaisseur (du tube C_1 au tube C_N sur la Fig. 6.14). L'évolution temporelle de la fluctuation de vitesse $u'(t)$ est mesurée au point P_1 situé 17 mm en amont du plan d'injection. La fluctuation du taux de dégagement de chaleur intégré spatialement dans chaque tube C_i ($\dot{\Omega}'_{T,i}$) est stockée au cours du temps. Le modèle $n - \tau$ s'écrit alors dans l'espace spectral:

$$\hat{\Omega}_i = S_0 \frac{\rho_0 c_0^2}{\gamma - 1} n_i e^{i\omega\tau_i} \hat{u}(P_1) \quad (6.5)$$

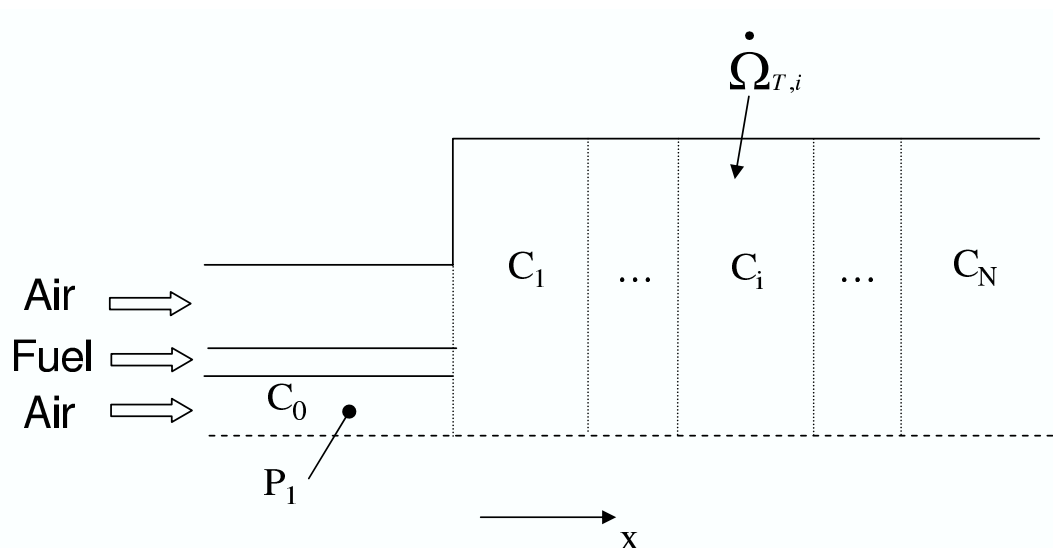


FIG. 6.14 – Schématisation des éléments 1-D permettant de représenter la chambre de combustion et la flamme dans un modèle acoustique 1-D, lorsque la zone réactive n'est pas compacte .

Dans un écoulement réactif turbulent, le signal du taux de dégagement de chaleur (pour mesurer une fonction de transfert) ou bien de pression dans les gaz brûlés (pour mesurer une matrice de transfert) est la somme de différentes contributions (Fig. 6.15):

- Un signal corrélé: cette contribution est directement corrélée au signal d'excitation et est nécessaire pour déterminer la fonction de transfert.
- Un bruit cohérent non corrélé avec la pulsation, qui est généré par la flamme avec une phase et une fréquence fixe. Il est complètement indépendant de la perturbation acoustique imposé. Ce signal est provoqué par les interactions naturelles entre la turbulence et la flamme.
- Un bruit aléatoire: c'est la partie incohérente du signal et la plus difficile à caractériser. Typiquement, elle est attribuée à l'écoulement turbulent, au bruit généré par la flamme et aux

erreurs numériques.

Pour déterminer la réponse de la flamme à l'excitation acoustique, seule la première contribution est utile. Cependant, les autres contributions sont difficilement dissociables dans le signal mesuré et les niveaux de bruits peuvent alors réduire la qualité des résultats. La cohérence entre le signal acoustique et le signal mesuré doit être utilisée comme un indicateur de la qualité des données et donc de la confiance à attribuer aux résultats. Cette section montre comment la cohérence peut être testée.

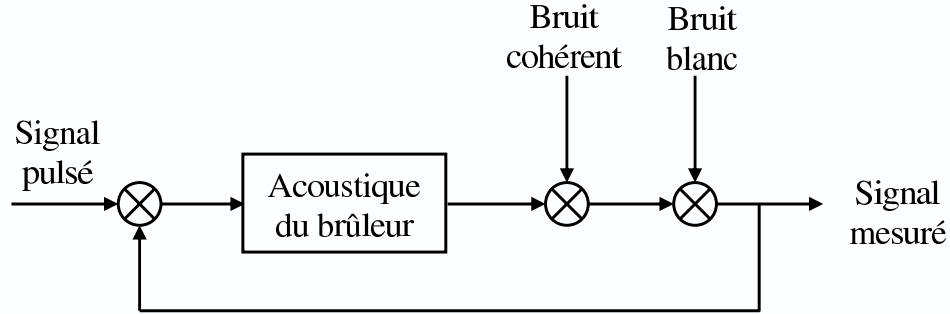


FIG. 6.15 – Différentes contributions dans le signal mesuré.

6.4.1 Fonction de cohérence

La fonction de cohérence est calculée à partir des spectres de corrélation entre deux signaux $x(t)$ et $y(t)$. Précisément, elle compare les densités spectrales de puissance de ces signaux

$$C_{xy}(f) = \frac{|S_{xy}(f)|^2}{S_{xx}(f) * S_{yy}(f)} \in [0, \dots, 1] \quad (6.6)$$

avec

$$S_{xy}(f) = TF \left[\lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_{-T/2}^{T/2} x(t)y(t - \tau) dt \right] \quad (6.7)$$

La fonction de transfert T_{xy} est alors calculée:

$$T_{xy}(f) = \frac{S_{xy}(f)}{S_{xx}(f)} \quad (6.8)$$

Lorsque C_{xy} est proche de l'unité, les signaux $x(t)$ et $y(t)$ sont bien corrélés. Néanmoins, il est intéressant de pouvoir quantifier précisément la valeur limite à partir de laquelle la fonction de transfert entre $x(t)$ et $y(t)$ n'a plus de signification physique. Pour cela, nous allons analyser l'effet d'un bruit aléatoire et d'un bruit cohérent sur la cohérence des signaux. La fluctuation de vitesse représentée par le signal $x(t)$ est modélisée par un signal parfaitement sinusoïdal de fréquence $f_e = 350$ Hz:

$$x(t) = \sin(2\pi f_e t) \quad (6.9)$$

La partie corrélée du signal est déphasée de $\pi/2$ par rapport à x :

$$y(t) = \sin(2\pi f_e t + \frac{\pi}{2}) \quad (6.10)$$

Deux cas sont traités:

- 1 La fluctuation du taux de dégagement de chaleur est la somme de deux contributions: la réponse cohérente de la flamme à la fluctuation de vitesse et un bruit aléatoire.
- 2 La fluctuation du taux de dégagement de chaleur est la somme de deux contributions: la réponse cohérente de la flamme à la fluctuation de vitesse et un bruit cohérent.

La question est de savoir combien de cycles acoustiques doivent être simulés pour obtenir une fonction de transfert significative lorsque l'amplitude du bruit augmente.

6.4.2 Test à priori de l'influence d'un bruit blanc

Afin de caractériser l'influence d'un bruit blanc, le signal y est défini par:

$$y(t) = \sin(2\pi f_e t + \frac{\pi}{2}) + a.Rand(t) \quad (6.11)$$

L'évolution temporelle des signaux x et y est tracée sur la Fig. 6.16 pour différentes valeurs de l'amplitude a du bruit. L'amplitude et la phase de la fonction de transfert T_{xy} ainsi que la cohérence des signaux sont présentés sur les Figs. 6.17 et 6.18. Les erreurs ξ_1 et ξ_2 (en %) induites sur la détermination de l'amplitude et de la phase respectivement sont estimées de la façon suivante:

$$\xi_1 = 100 * |1 - |T_{xy}|| \quad (6.12)$$

$$\xi_2 = 100 * \frac{|\pi/2 - \varphi(T_{xy})|}{\pi/2} \quad (6.13)$$

On observe logiquement une diminution de la cohérence lorsque l'amplitude du signal stochastique augmente, pouvant conduire jusqu'à 30% d'erreur sur la valeur absolue de T_{xy} (Fig. 6.17) et 10% sur sa phase (Fig. 6.18) lorsque $a = 15$. Si on considère que l'erreur sur $|T_{xy}|$ devient significative à partir de 10%, alors la valeur limite de la cohérence pour considérer un résultat acceptable est $C_{xy} = 0.9$.

La Fig. 6.19 présente l'évolution de la cohérence des signaux lorsque le nombre de cycles varie. Si la partie aléatoire du signal est plus faible que la partie corrélée, alors la cohérence est bonne quel que soit le nombre de cycle utilisé. Pour une amplitude du bruit jusqu'à 5 fois supérieure à la partie corrélée de y , au moins 20 cycles acoustiques de temps simulé sont nécessaires pour obtenir une cohérence égale ou supérieure à 0.9.

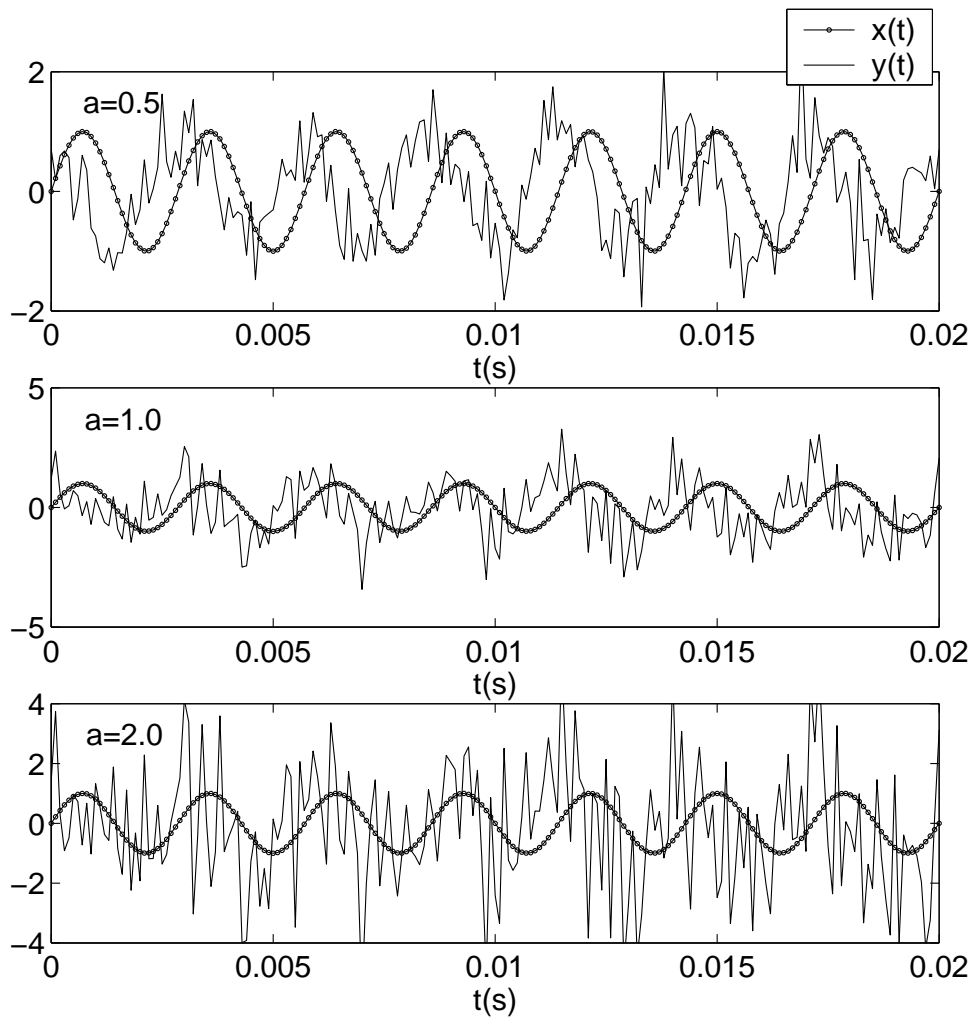


FIG. 6.16 – Comparaison des signaux x et y pour différentes valeurs de l'amplitude du bruit. Le signal x est une sinusoïde parfaite, alors que le signal y est constitué d'une partie cohérente corrélée avec le signal x et d'un bruit blanc, dont l'amplitude a vaut ici 0.5, 1.0 et 2.0.

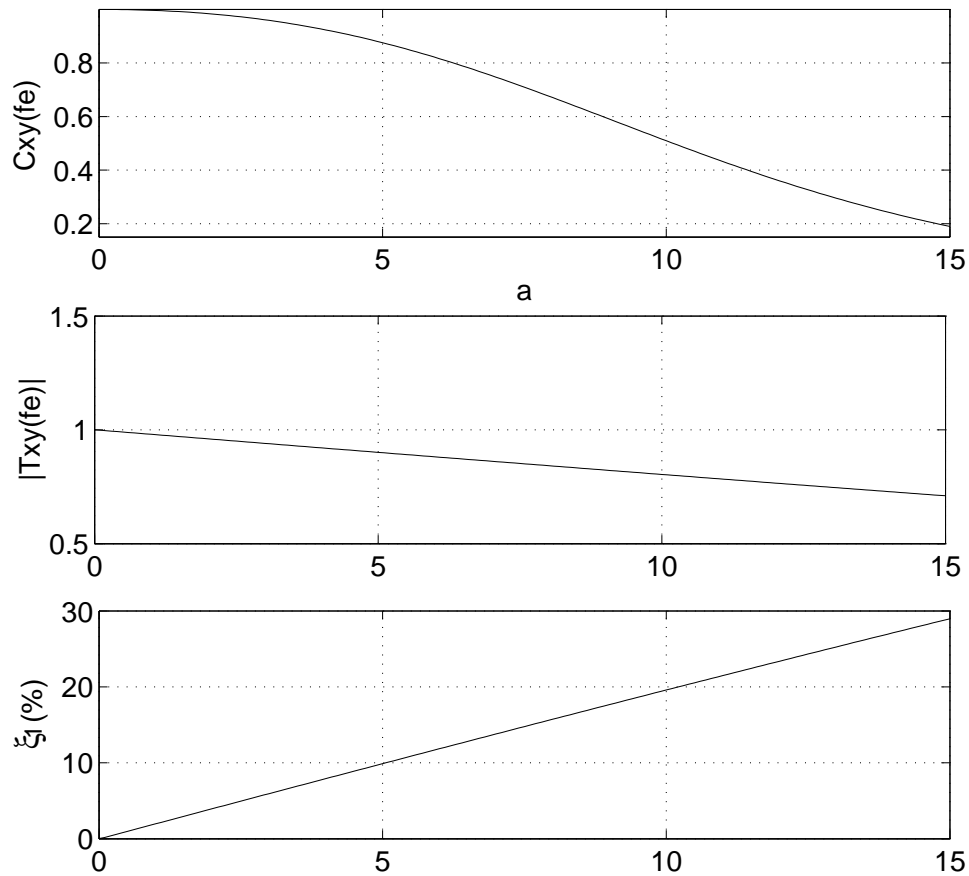


FIG. 6.17 – Evolution de la fonction cohérence et de l’erreur faite sur le calcul de la phase de T_{xy} , lorsque l’amplitude a du bruit varie. La partie non corrélée de y est un bruit aléatoire (section 6.4.2).

Chaque signal contient 10 périodes.

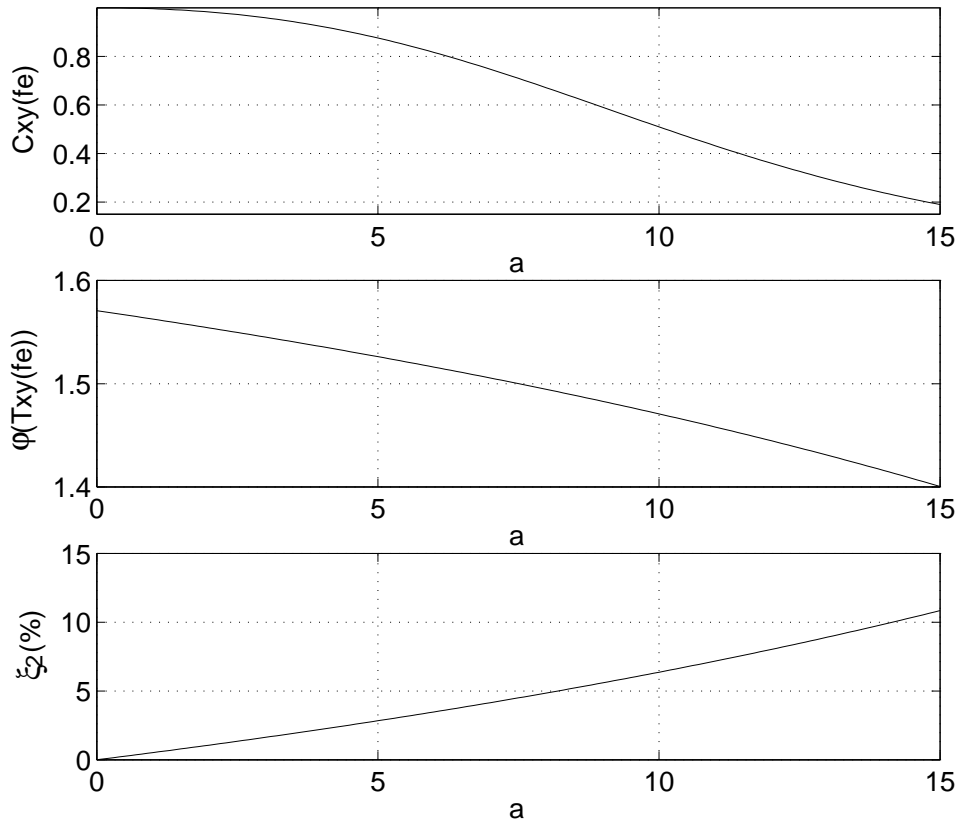


FIG. 6.18 – Evolution de la fonction cohérence et de l’erreur faite sur le calcul de l’amplitude de T_{xy} , lorsque l’amplitude a du bruit varie. La partie non corrélée de y est un bruit aléatoire (section 6.4.2).

Chaque signal contient 10 périodes.

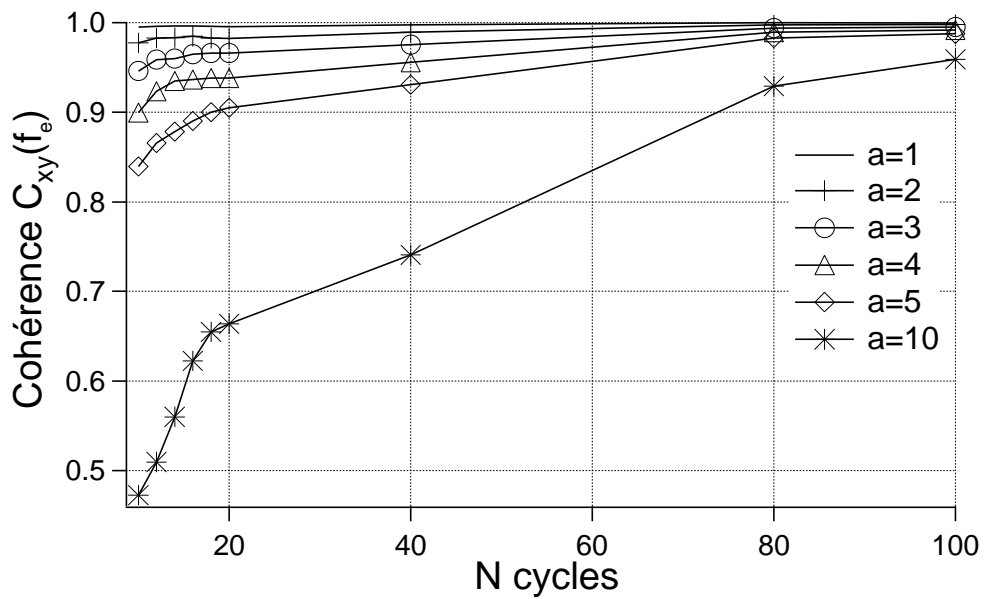


FIG. 6.19 – Evolution de la fonction cohérence en fonction du nombre de cycles et pour différentes valeurs de l’amplitude du bruit. La partie non corrélée de y est un bruit aléatoire (section 6.4.2).

6.4.3 Test à priori de l'influence d'un bruit cohérent

La partie cohérente du signal y est générée par les interactions entre la flamme et la turbulence pour des fréquences différentes de la fréquence d'excitation. Pour la présente évaluation, nous supposons que l'enveloppe du spectre d'énergie de ce bruit est similaire à la forme du spectre de l'énergie cinétique turbulente de l'écoulement. Pour simplifier, nous considérons une turbulence homogène et isotrope. Dans ce cas, le spectre d'énergie décroît en $f^{-5/3}$ dans la zone inertielle. De plus, ce bruit cohérent contient des contributions significatives dans le domaine des basses fréquences. Typiquement $20 \text{ Hz} < f < 400 \text{ Hz}$, au delà duquel le bruit devient faible. Ainsi, nous modélisons la partie cohérente du signal à l'aide d'une somme de 8 sinusoïdes de périodes et de phases fixes. Les fréquences sont situées entre 40 et 400 Hz avec un maximum à 120 Hz (Fig. 6.20). Finalement le signal y s'écrit:

$$y(t) = \sin(2\pi f_e t + \frac{\pi}{2}) + a \sum_{k=1}^{n_{freq}} E(f_k) \sin(2\pi f_k t + \varphi_k) \quad (6.14)$$

La Fig. 8.10 présente l'évolution de la cohérence des signaux lorsque le nombre de cycles varie. Pour une amplitude du bruit a jusqu'à deux fois plus petite que la partie corrélée de y , la cohérence reste satisfaisante. Pour une amplitude de l'ordre de grandeur du signal corrélé, au minimum 20 cycles sont nécessaires pour obtenir une cohérence de l'ordre de 0.9. Évidemment, ces résultats dépendent du choix des fréquences du signal non corrélé, mais ils permettent de montrer combien la qualité des résultats dépend du bruit mesuré. On peut aussi en conclure qu'un calcul numérique de 20 cycles acoustiques devrait être suffisant pour obtenir une bonne cohérence. Compte tenu du coût de la LES, cette information est bien sûr critique: expérimentalement, les fonctions de transfert peuvent être évaluées sur des milliers de cycles, mais ceci est impensable en LES. Il faut donc savoir à partir de combien de cycles la LES donne un résultat significatif.

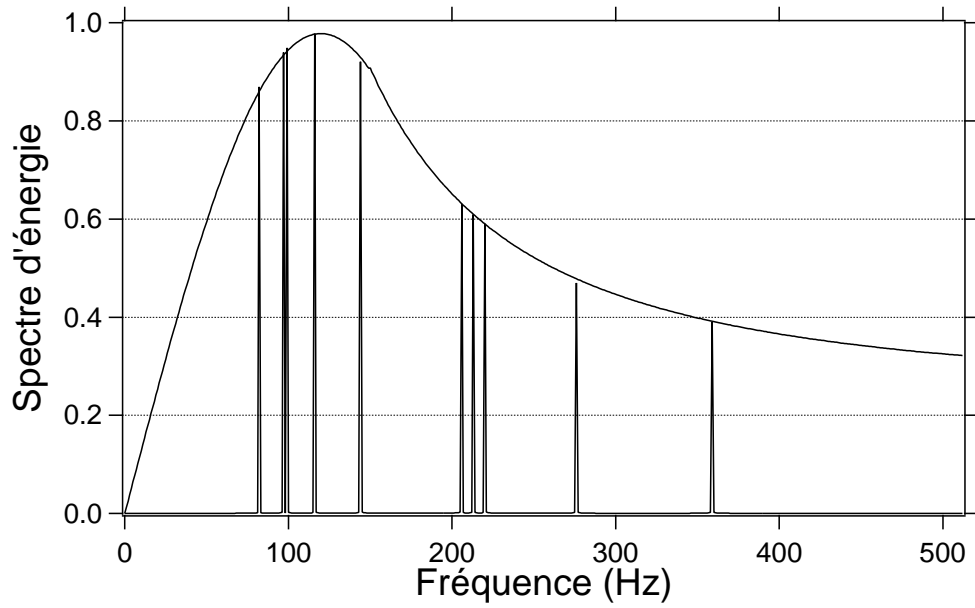
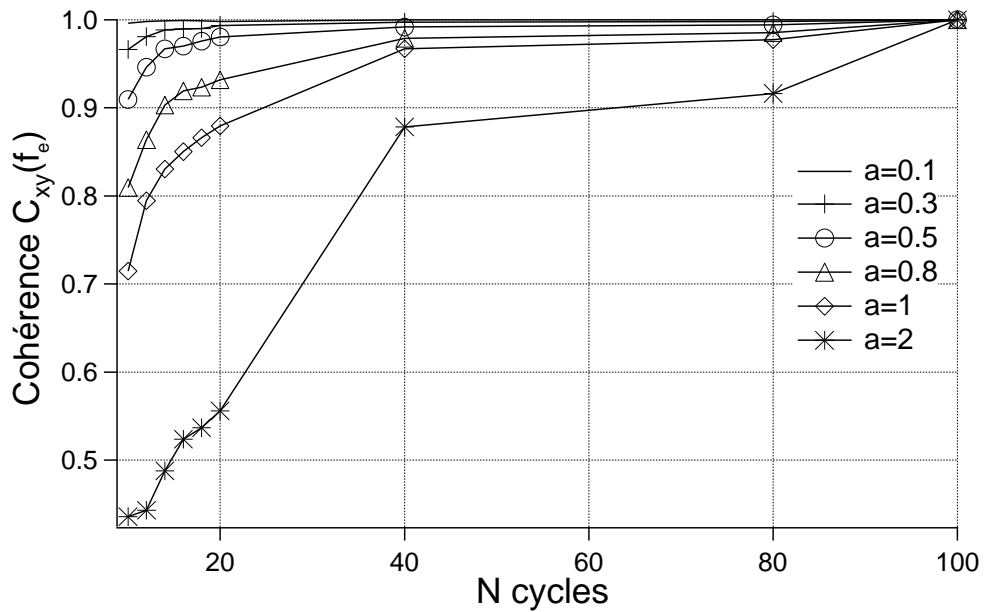


FIG. 6.20 – Spectre d'énergie du bruit cohérent.

FIG. 6.21 – Evolution de la fonction cohérence en fonction du nombre de cycles et pour différentes valeurs de l'amplitude du bruit. La partie non corrélée de y est un bruit cohérent.

Chapitre 7

Résultats sans excitation

7.1 Choix du maillage

Comme mentionné dans la section 6.3.4, le maillage pour le calcul 3D doit être suffisamment fin, pour capter les phénomènes hydrodynamiques permettant la stabilisation de la flamme (couche de mélange, dynamique du mélange). D'autre part, il faut tenir compte des temps de calculs, des capacités de mémoire et de stockage des calculateurs utilisés. Un maillage M1 (Tableau 7.1) de résolution deux fois moins fine que le maillage 2D (M2) de référence [99] (voir section 6.3.4), conduit à une configuration 3D de 1,2 millions de noeuds, ce qui semble être un bon compromis.

Dans cette section, nous vérifions que le choix du maillage n'altère pas la solution. Deux calculs ont été réalisés dans les mêmes conditions (voir section 6.3), l'un avec le maillage 2D de taille caractéristique $\Delta_x = \Delta_y = 0.57$ mm (noté M2), l'autre avec le maillage 2D de taille caractéristique $\Delta_x = \Delta_y = 1.1$ mm (noté M1). Le seul paramètre qui diffère est le facteur d'épaississement. Il est choisi en sorte d'avoir le minimum de point raisonnable pour résoudre l'Arrhénius dans la flamme. En effet, dans les conditions de stœchiométrie, l'épaisseur de flamme est de 0.32 mm. Donc, un épaississement de 15 et de 25 ont été utilisés respectivement avec les maillages M2 et M1 pour avoir typiquement 8 points dans la flamme.

	Maillages tests	
	M1	M2
Types	2D	2D
Noeuds	14,500	55,000
Δ_x	1.1 mm	0.57 mm

TAB. 7.1 – Caractéristiques des maillages 2D testés dans cette section.

La dépendance de la solution suivant la résolution du maillage est présentée sur la Fig. 7.1. Les moyennes sont obtenues après 50 ms de calcul, soit environ 3 temps convectifs. Les profils de la vitesse axiale à 2 mm derrière le plan d'injection ne diffèrent pas significativement. La bonne prédiction du profil de vitesse est cruciale pour capter les phénomènes hydrodynamiques des couches de mélange. L'accélération de la vitesse axiale sur l'axe de symétrie est identique pour les deux maillages. Cette accélération correspond à la dilatation de l'écoulement dans les gaz brûlés. Les fluctuations rms de la vitesse axiale u_{rms} sont comparés sur la Fig. 7.2. On constate que les niveaux de turbulence sont semblables pour les deux maillages et relativement faibles: on n'injecte pas de turbulence et l'écoulement n'est pas vrillé. Les niveaux de fluctuations sont élevés dans les zones de cisaillements situées en aval du plan d'injection ($0 \text{ mm} < x < 30\text{mm}$). Dans cette

zone, le maximum de turbulence est obtenu légèrement plus en amont avec le maillage fin $M2$ qu'avec le maillage $M1$. La densité spectrale de la vitesse axiale calculée au point A (Fig.7.2)

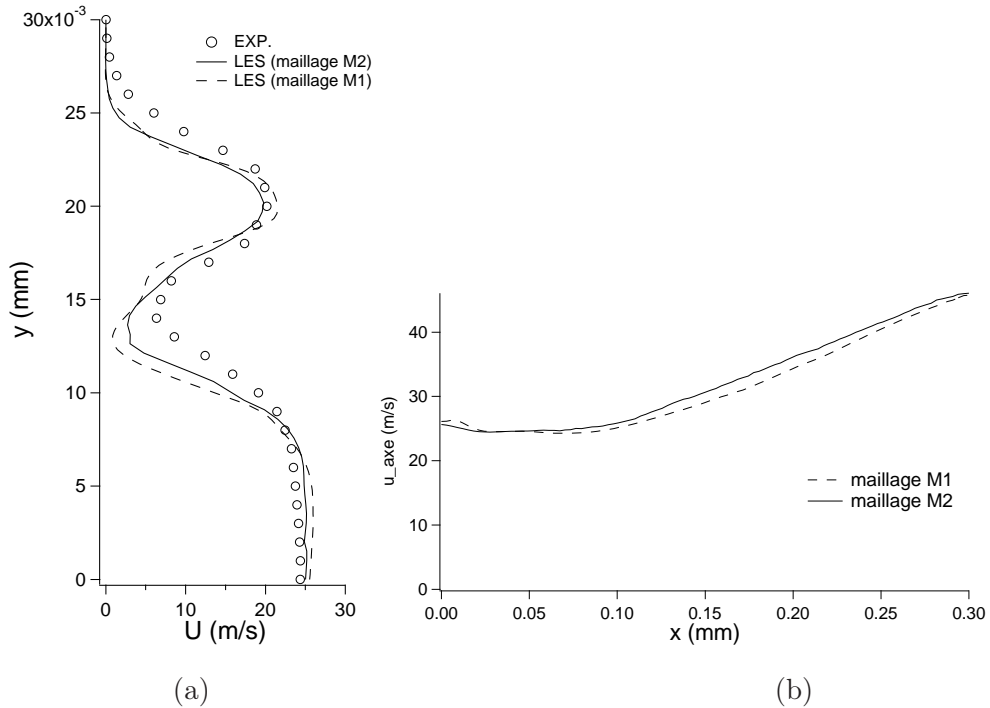


FIG. 7.1 – Dépendance au maillage de la vitesse axiale. (a) Profil de vitesse moyen à 10 mm du plan d'injection. (b) Profil de vitesse sur l'axe central (plan de symétrie).

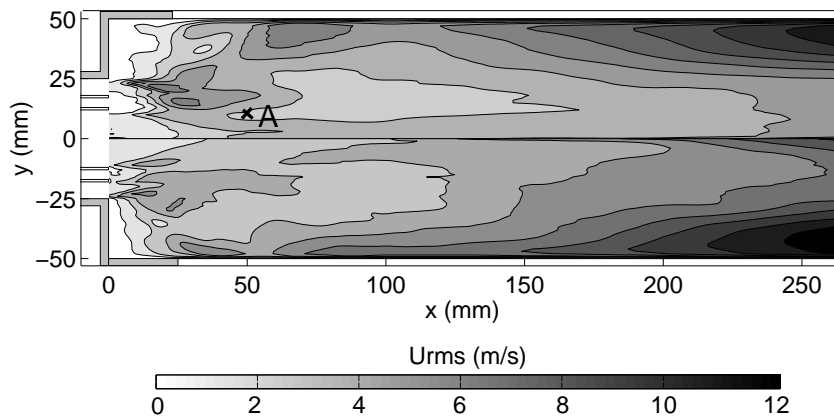


FIG. 7.2 – Champ rms de la fluctuation de vitesse axiale. En haut: LES 2D avec maillage M1; en bas: LES 2D avec maillage M2.

est présentée sur la Fig. 7.3. Bien que les résultats soient un peu bruités du fait du manque de résolution (20 Hz), la cascade d'énergie a un bon comportement pour les deux maillages. L'énergie spectrale obtenues avec le maillage M1 est située légèrement en dessous de celle du maillage M2, car l'intensité turbulente en ce point est légèrement plus faible. Le maximum d'énergie correspond à une taille de tourbillons environ égale à 14 mm. Enfin, les champs moyens

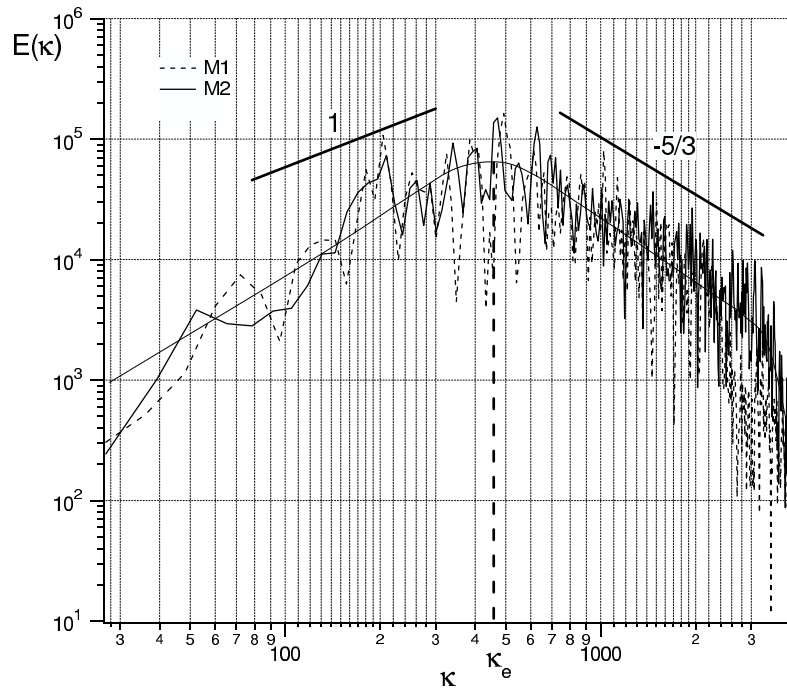


FIG. 7.3 – Densité de puissance spectrale de la vitesse axiale au point A (Fig. 7.2)

de taux de dégagement de chaleur sont comparés à l'émission de CH^+ (Fig. 7.4) pour vérifier que le passage du maillage M2 au maillage M1 n'altère pas la position moyenne de la flamme. La zone de réaction avec M2 est plus large qu'avec M1. En effet, la flamme épaissie 15 fois (maillage M2), est sensible aux tourbillons jusqu'à la taille minimum $F\delta_L^0 = 4.8$ mm, alors que la flamme épaissie 25 fois (maillage M1) est sensible aux tourbillons jusqu'à 8 mm. La flamme du maillage M2 présente donc un battement vertical plus accentué que la flamme épaissie 25 fois. D'autre part, la position du maximum de dégagement de chaleur pour le calcul M1 est légèrement plus proche des injecteurs que pour le calcul M2. Néanmoins, malgré ces différences, les résultats sont globalement très proches. Pour conclure sur le choix du maillage, deux LES ont été réalisés avec deux maillages différents M1 et M2. Les comparaisons en terme de dissipation, d'intensité turbulente, de représentation spectral de la vitesse et de position moyenne de la flamme, montrent que la solution n'est pas altérée avec le maillage plus grossier M1. A présent, une simulation aux grandes échelles du brûleur en 3 dimensions est réalisée, en utilisant un maillage structurée de taille caractéristique de maille (Δ_x) semblable au maillage M1. Ce maillage 3D final comporte 1,29 millions de noeuds et 1,23 millions de cellules (Fig 7.5). Les calculs 3D -ont été réalisés sur 64 processeurs d'une SGI Origin 3800 du CINES centre national de calcul (www.cines.fr). Typiquement, une simulation nécessite 5.5 gygabites de mémoire et environ 90 heures de temps CPU pour un temps convectif simulé.

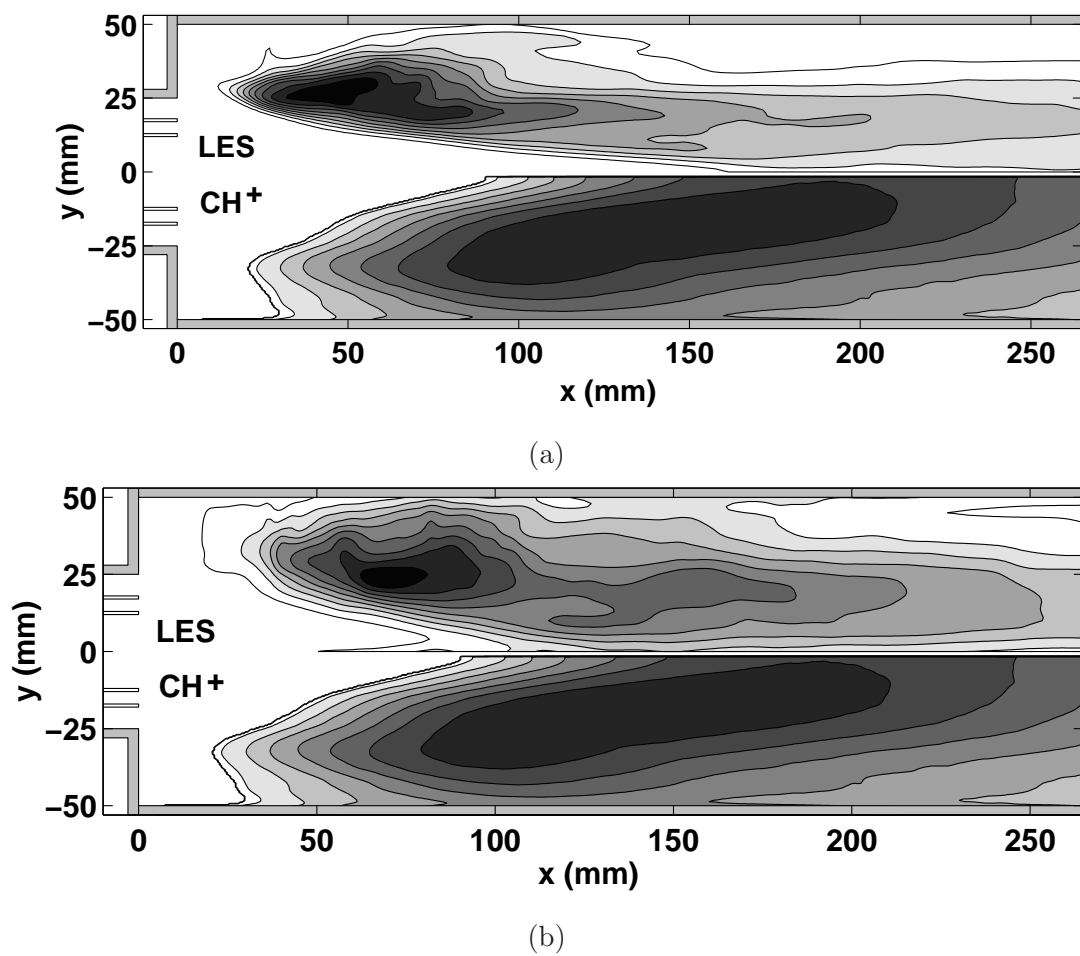


FIG. 7.4 – Comparaison du taux de dégagement de chaleur $\dot{\omega}_T$ et de l'émission de CH^+ : (a) comparaison avec le maillage 2D M1, (b) comparaison avec le maillage 2D M2.

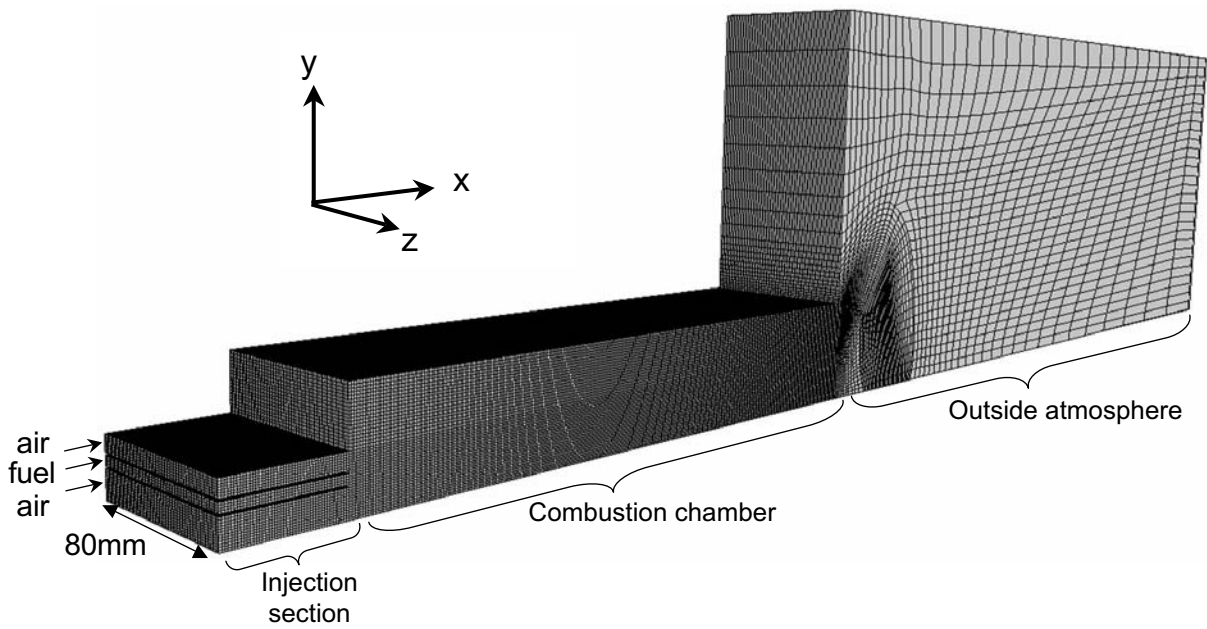


FIG. 7.5 – Vue du maillage 3D

7.2 Structure de la flamme décrochée

7.2.1 Caractérisation du régime de combustion

Il est difficile de situer le régime des zones de réactions sur le diagramme du fait de la grande variation de richesses dans le mélange. Néanmoins, il est toujours possible d'établir des ordres de grandeurs en supposant que la flamme brûle principalement en prémélange (on le vérifiera plus loin). Les valeurs de S_L et δ sont déterminées pour une flamme laminaire 1D à la stœchiométrie. En se plaçant dans le cas de la combustion prémélangée, on obtient à partir des paramètres donnés dans le Tableau 7.2, les valeurs $u'/S_L = 10$ et $l_t/\delta = 350$. En plaçant ce point sur le diagramme 2.3, on constate que l'on se situe près de la frontière $Ka = 1$, c'est à dire près du régime dit "de flammelettes".

u'	S_L	l_t	δ
5 m/s	0.47 m/s	14 10^{-3} m	4 10^{-5} m

TAB. 7.2 – Paramètres pour le diagramme de combustion prémélangée

7.2.2 Caractérisations des différents types de flammes

Le régime de flamme décrochée met en évidence des flammes de prémélange et de diffusion. Il est possible de distinguer les deux régimes en utilisant la formule suivante [42,127]:

$$Regime = \frac{(\dot{\omega}_{F,min} - \dot{\omega}_F)(\dot{\omega}_{F,max} - \dot{\omega}_F)}{(\dot{\omega}_{F,min} - \dot{\omega}_{F,max})} \frac{\vec{\nabla}Y_F \cdot \vec{\nabla}Y_O}{\|\vec{\nabla}Y_F\| \cdot \|\vec{\nabla}Y_O\|} \quad (7.1)$$

Dans le cas d'une flamme de prémélange où les réactifs sont consommés en même temps, les gradients des espèces sont du même signe, d'où le signe positif du produit scalaire $\vec{\nabla}Y_F \cdot \vec{\nabla}Y_O$, ainsi:

$$Regime = Regime_{prem} > 0 \quad (7.2)$$

Dans le cas d'une flamme de diffusion, les réactifs sont séparés et diffusent vers la flamme dans des directions opposées, de sorte que les gradients sont de signe contraire, d'où le signe négatif du produit scalaire $\vec{\nabla}Y_F \cdot \vec{\nabla}Y_O$, ainsi:

$$Regime = Regime_{diff} < 0 \quad (7.3)$$

Des champs obtenus à partir d'une coupe longitudinale au centre du brûleur (dans le plan $z = 0.04$ m) sur une solution instantanée sont présentées sur les Figs 7.8 et 7.9. Sur la Fig. 7.8(b) les

contours du régime de flamme sont tracés sur le champ de la richesse. Les régimes de flammes prémélangées sont représentés par les contours noirs, tandis que les flammes de diffusion sont représentées par les contours blancs. Il est facile de vérifier que ces flammes de diffusion se développent le long de la ligne stœchiométrique (tracée en gras sur la figure). D'autre part, nous remarquons que le régime de prémélange est prépondérant par rapport au régime de diffusion. Des profils de flamme sont extraits suivant les coupes A-B et C-D de la Fig. 7.8(b). La Fig. 7.6(a) correspond à une flamme locale de prémélange riche. La Fig. 7.6(b) est typique de la combustion partiellement prémélangée: Une flamme de prémélange pauvre est suivie d'une flamme de diffusion. L'oxygène en excès issu de l'écoulement d'air central réagit avec du propane convecté dans une poche de gaz brûlés et qui n'a pas été entièrement consommée au passage d'une flamme de prémélange riche.

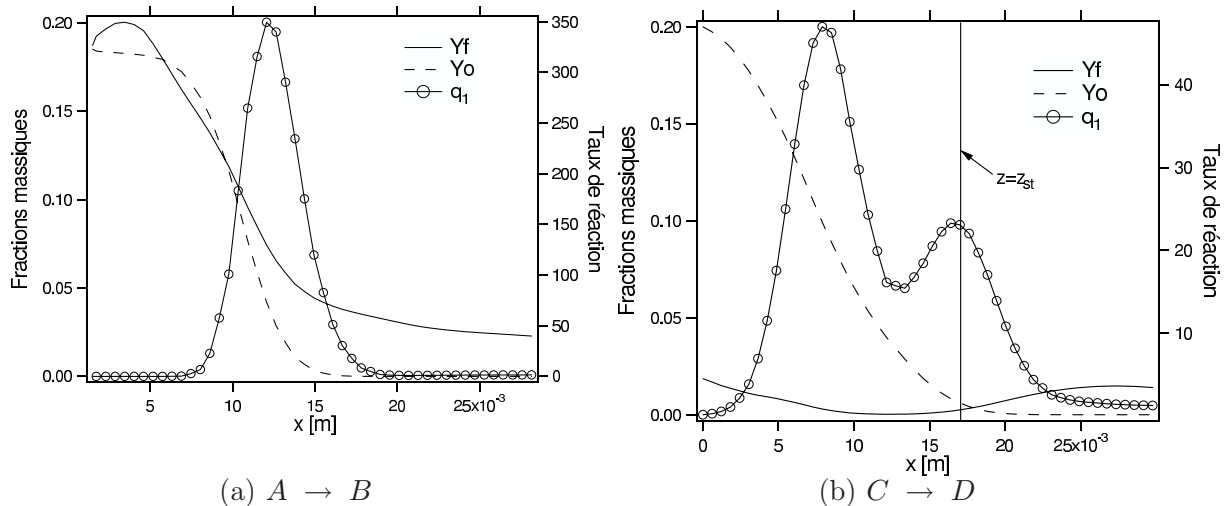


FIG. 7.6 – Profils de flamme de prémélange et flamme de diffusion obtenus respectivement suivant les coupes $A \rightarrow B$ et $C \rightarrow D$ visibles sur la Fig. 7.8(b)

7.3 Dynamique de la flamme

7.3.1 Stabilisation de la flamme

Le mécanisme de stabilisation de la flamme peut être expliqué à l'aide du schéma de la Fig. 7.7 et des champs instantanés sur les Figs. 7.8 à 7.10. La vitesse axiale au niveau des injecteurs (Fig. 7.10(a)) est bien supérieure à la vitesse de flamme. Celle-ci ne peut donc pas se stabiliser devant les injecteurs. Par contre, la marche crée une zone de recirculation qui contient des gaz brûlés et qui permet à la flamme de se stabiliser. La zone de recirculation est visible sur la

Fig. 7.10(a) avec l'isoligne $u = 0$ et le champ de température est représenté sur la Fig. 7.9(b).

Comme le propane et l'air sont injectés séparément (Figs. 7.8(c) et 7.8(d)), une couche de mélange se forme, délimitée par la ligne stœchiométrique. À l'intérieur de cette ligne, un mélange riche se forme (Fig. 7.8(a)). Une partie de ce mélange brûle sous forme de prémélange riche (Fig. 7.8(b)). Ce mécanisme est illustré sur le schéma de la Fig. 7.7. La poche de mélange riche brûle en prémélange, une partie du propane en excès est mélangé aux gaz brûlés et ramené vers la zone de recirculation où il va brûler en diffusion avec l'air issu du jet d'air supérieur.

Enfin, la présence de CO dans les gaz chauds (Fig. 7.9(a)) contribue à diminuer la température des gaz brûlés, notamment dans la zone de recirculation, par l'existence d'un équilibre endothermique. Ainsi, la flamme est stabilisée plus loin derrière la marche.

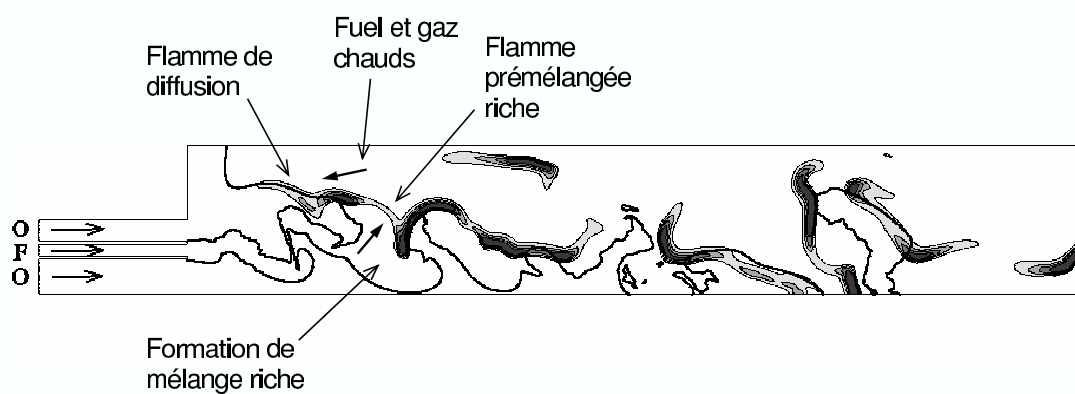
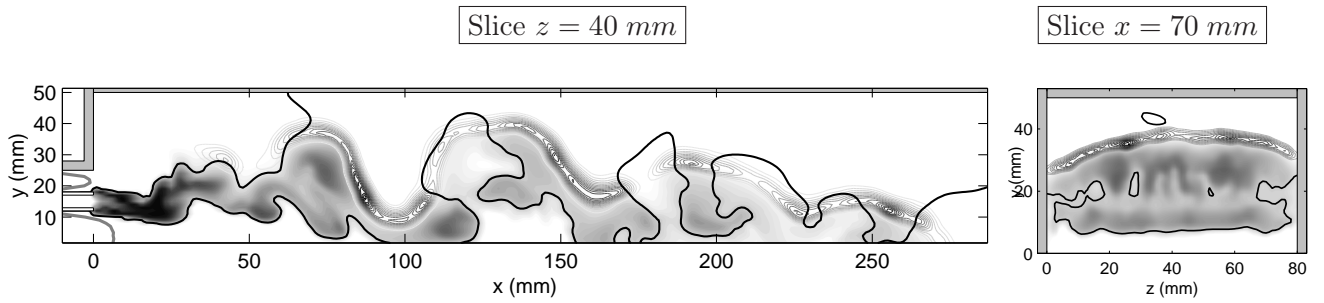
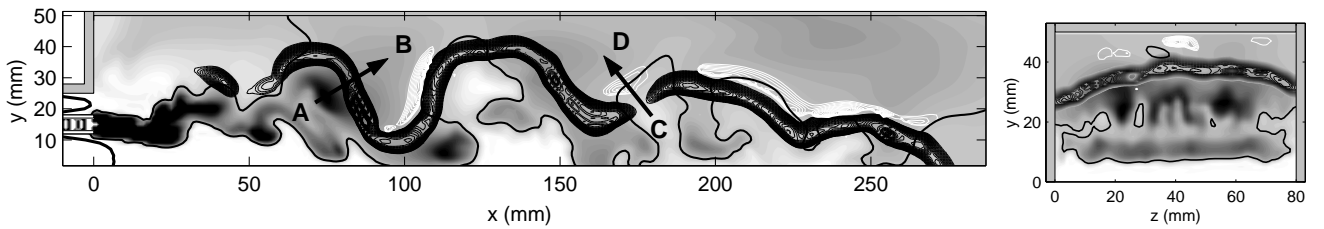


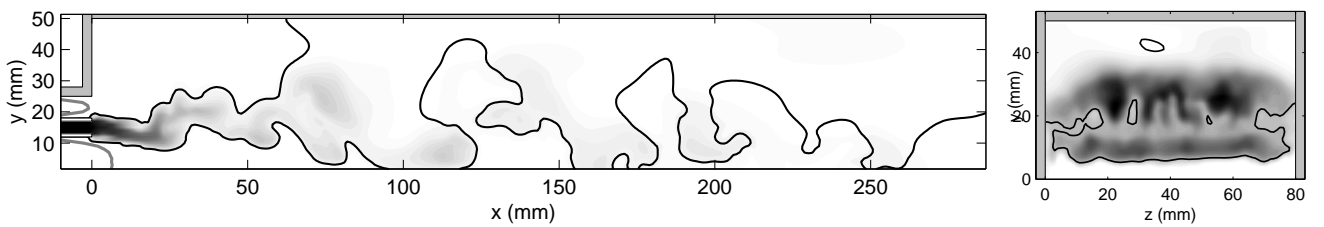
FIG. 7.7 – Description schématique du processus de stabilisation de la la flamme décrochée.



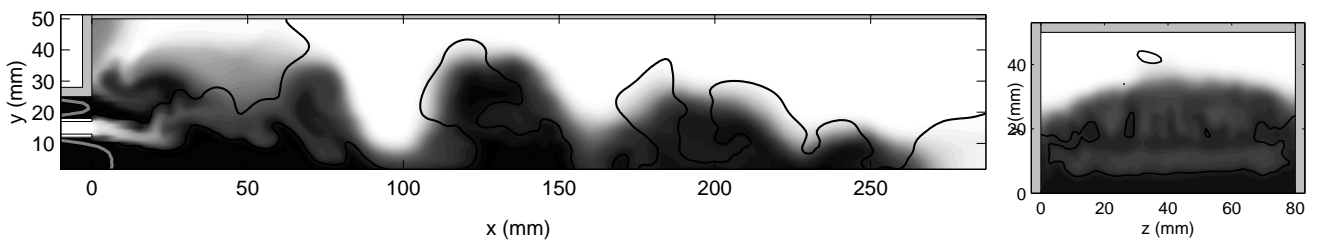
(a) trait gras = ligne stœchiométrique ($z = z_{st}$), contours du taux de dégagement de chaleur $\dot{\omega}_T$ et champ de l'indice de mélange $Y_f * Y_o$ (échelle entre 0: blanc et 0.06: noir).



(b) Ligne stœchiométrique (trait gras), contours du taux de réaction: en noir, flamme de prémélange et en blanc, flamme de diffusion et champ de la richesse (échelle entre 0: blanc et 3: noir).



(c) Ligne stœchiométrique (trait gras) et fraction massique de propane (échelle entre 0: blanc et 1: noir).



(d) Ligne stœchiométrique (trait gras) et fraction massique d'oxygène (échelle entre 0: blanc et 0.233: noir).

FIG. 7.8 – Champs instantanés

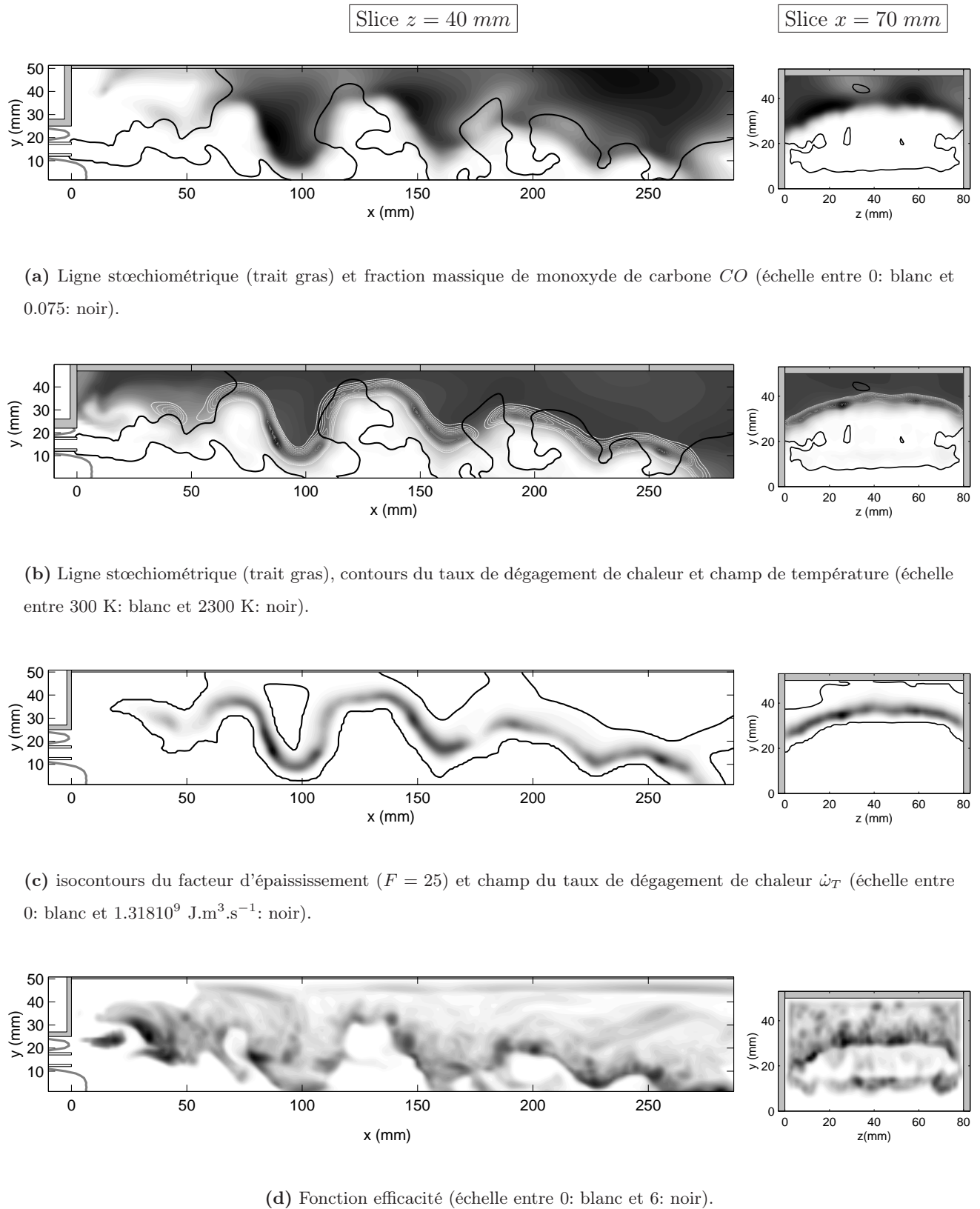
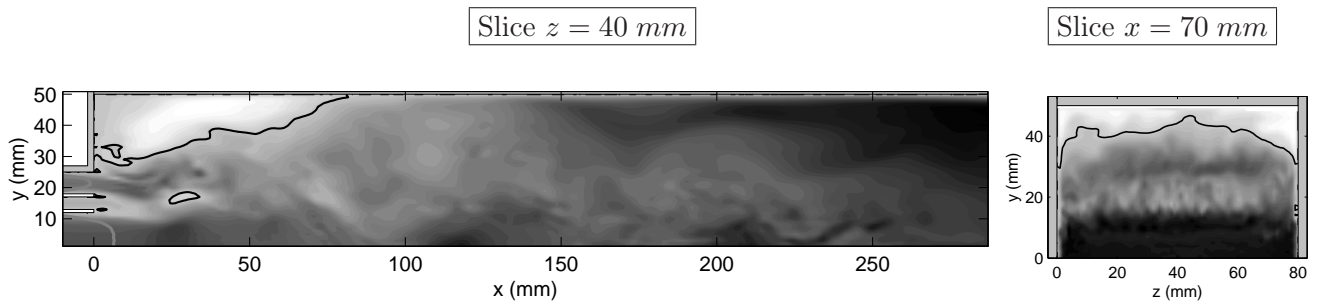
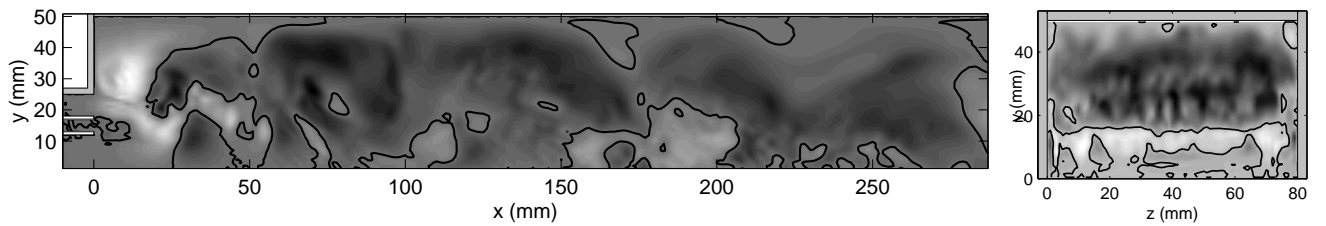


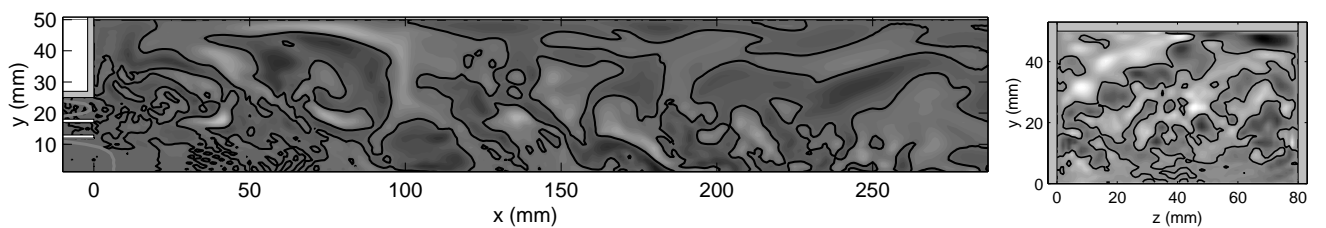
FIG. 7.9 – Champs instantanés



(a) Isocontours de vitesse axiale nulle ($u = 0$) et champ de vitesse axiale échelle entre -13 (m/s): blanc et 42 (m/s): noir).



(b) Isocontours de vitesse verticale nulle ($v = 0$) et champ de vitesse verticale (échelle entre -10 (m/s): blanc et 9 (m/s): noir).



(c) Isocontours de vitesse transverse nulle ($w = 0$) et champ de vitesse transverse (échelle entre -16 (m/s): blanc et 16 (m/s): noir).

FIG. 7.10 – Champs instantanés

7.3.2 Influence des couches de mélange

Les écoulements cisailés sont présents dans de nombreuses applications. Une couche de cisaillement se forme lorsque deux écoulements parallèles de vitesses différentes interagissent entre eux. Le champ de vitesse possède alors un point d'inflexion. Cette région est caractérisée par la présence d'un gradient de vitesse auquel correspond un champ de rotationnel: les structures commencent à tourbillonner autour du point d'inflexion. Hors de cette zone, l'écoulement est irrotationnel. Une telle situation est susceptible de déclencher une instabilité de Kelvin-Helmholtz.

L'identification des structures cohérentes dans les écoulements s'avère nécessaire pour de nombreuses études, notamment pour caractériser les inhomogénéités de mélange. La détection de la vorticité $\|\vec{\omega}\|$ n'indique pas nécessairement la présence d'un tourbillon, en particulier lorsque la valeur du cisaillement est comparable à la valeur de la vorticité. De plus, dans le cas de simulations numériques incluant des murs, le champ de vorticité fait apparaître de forts cisaillements près des parois. Afin de remédier à ce défaut, un critère est utilisé ici: le critère Q [72] (voir Annexe A.1).

La Fig. 7.11 présente différents champs instantanés successifs (séparés de 0.24ms) sur une coupe longitudinale au milieu de la chambre. Les structures cohérentes au niveau des couches de cisaillement sont très clairement détectées par le critère Q. Ces structures sont convectées dans les gaz frais et vont interagir avec la flamme. Il est intéressant de visualiser les effets combinés des rouleaux et de la zone de recirculation. En effet, l'instabilité hydrodynamique de la couche de mélange génère des lâchers de tourbillons. Ceux-ci favorisent le mélange entre le propane et l'air et activent la combustion. Simultanément, la zone de réaction ramène les gaz chauds vers le plan d'injection. Lorsque les poches de réactifs sont convectées vers la zone des gaz brûlés, délimitée par l'isotherme $T = 600$ K, les conditions sont réunies pour créer l'allumage de la flamme (Fig. 7.11(b) et Fig. 7.11(c)). Ensuite, on peut observer comment la flamme se plisse au contact des tourbillons (Fig. 7.11(c) à Fig. 7.11(f)) et comment ceux-ci s'atténuent au passage de la flamme.

Lorsque la pénétration du jet global composé d'air et de propane est suffisamment importante, le jet présente une oscillation basse fréquence ($f \approx 90$ Hz). Une explication possible de ce mode est l'instationnarité due à l'élargissement brusque. Le couplage entre la flamme et cette instationnarité peut être mis en évidence à l'aide d'une analyse spectrale. Les transformées de Fourier du signal du taux de dégagement de chaleur global obtenu avec la LES $\dot{\Omega}_T(t) = \int_V \dot{\omega}_T(t) dv$ et du signal d'émission de CH^+ intégré dans la chambre sont comparées sur la Fig. 7.12. La transformée de Fourier de ces quantités est obtenue après 20 cycles, permettant une résolution

spectrale de 20 Hz. La fréquence 90 Hz apparaît très clairement. On peut donc penser que ce pic est lié au phénomène de détachement tourbillonnaire derrière la marche.

Pour caractériser le spectre naturel des fluctuations de $\dot{\omega}_T$, nous avons calculé la densité spectrales de $\dot{\omega}_T$, $S_{\dot{\omega}'_T \dot{\omega}'_T}$ et comparé les résultats avec l'expérience (Fig. 7.13). Le temps de calcul de la simulation numérique est de 50 ms, alors que les résultats expérimentaux sont obtenus après un échantillonnage d'1 s. On constate que les interactions basses fréquences (< 100 Hz) sont présentes dans toute la chambre. Dans l'expérience, le maximum de la densité spectrale est obtenu au voisinage de la zone de recirculation ($5 \text{ cm} < x < 10 \text{ cm}$) pour des basses fréquences (50 – 60 Hz). On observe moins nettement l'augmentation de $S_{\dot{\omega}'_T \dot{\omega}'_T}$ avec la LES, du fait du manque de résolution. Dans les deux cas, on observe clairement la bande spectrale entre 150–200 Hz à partir de 60 mm dans la LES et de 70 mm dans l'expérience. Néanmoins dans la simulation, cette caractéristique disparaît dans la seconde moitié de la chambre, alors qu'elle s'intensifie dans l'expérience. Le calcul des modes propres de l'ensemble de l'installation expérimentale donne un mode à 178 Hz. Il est donc probable que la réponse autour de 170 Hz corresponde à un mode acoustique, ce qui ne peut être reproduit dans le calcul numérique, qui ne prend en compte que les injecteurs et la chambre de combustion. La densité spectrale croisée $S_{u' \dot{\omega}'_T}$ entre les fluctuations de vitesse u' mesurées en amont du plan d'injection et les fluctuations du taux de dégagement de chaleur $\dot{\omega}'_T$ (Fig. 7.13(c) et (d)), met en évidence le couplage entre la flamme (dans la première moitié de la chambre) et les phénomènes hydrodynamiques basses fréquences (recirculation des gaz, détachement tourbillonnaire).

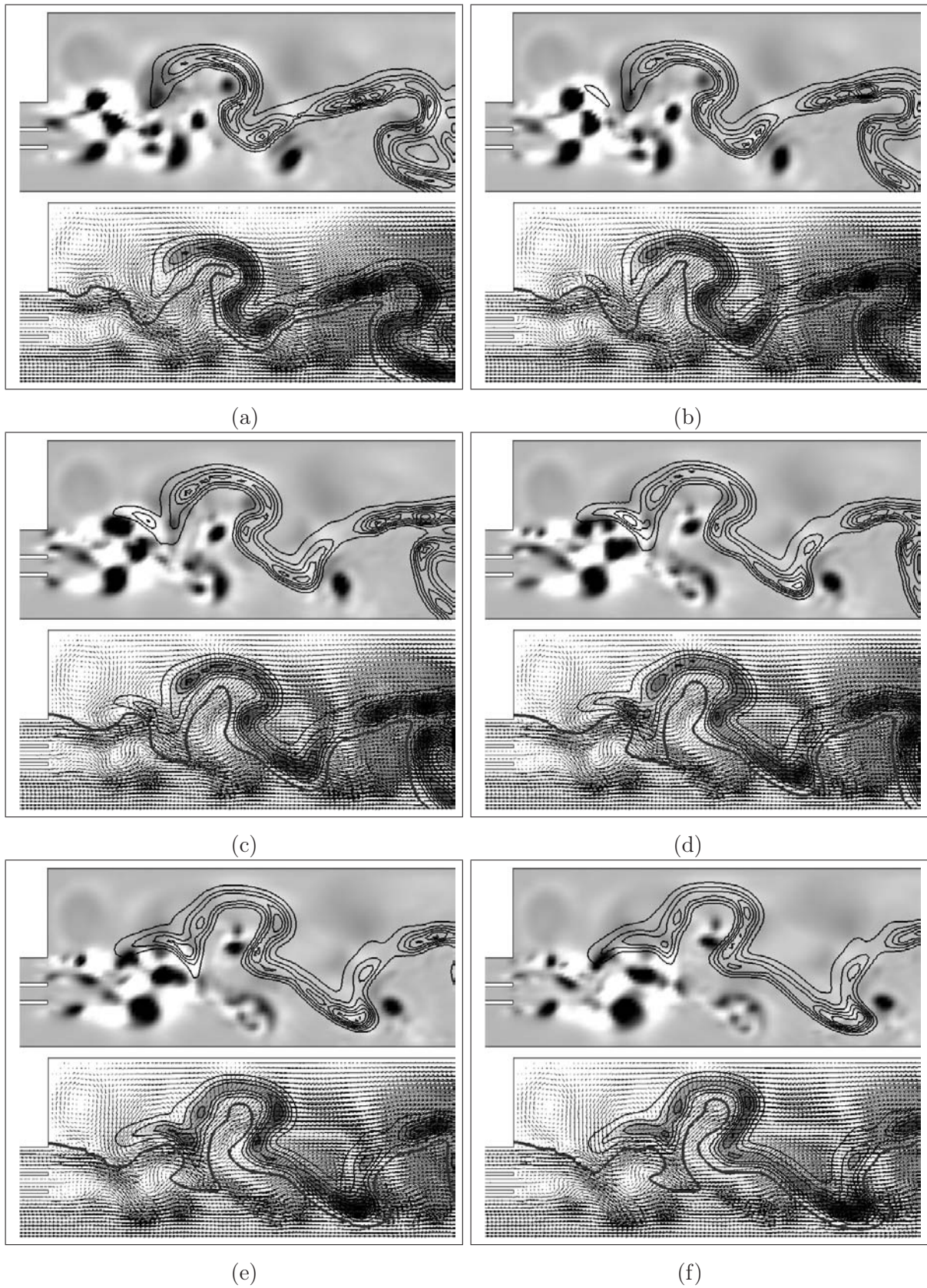


FIG. 7.11 – Coupe longitudinale de champs instantanés. En haut: champ de vorticité (critère Q) et contours du taux de réaction; en bas: vecteurs vitesses, contours du taux de réaction et en trait gras isotherme $T = 600$ K.

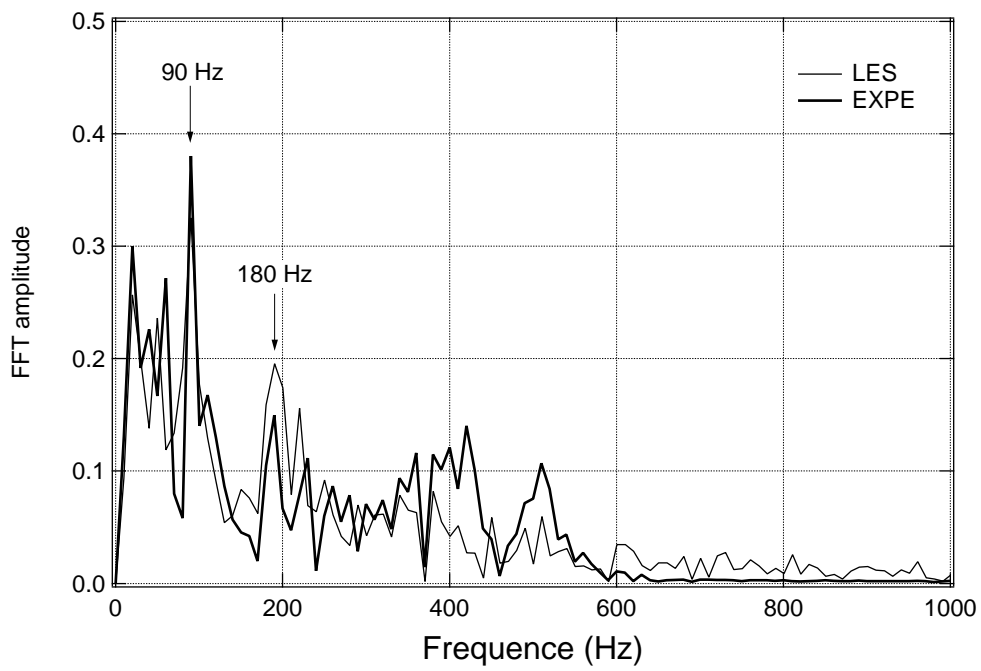


FIG. 7.12 – Transformée de Fourier du taux de dégagement de chaleur global $\dot{\Omega}_T(t)$ obtenu avec la LES et du signal d'émission global de CH^+ .

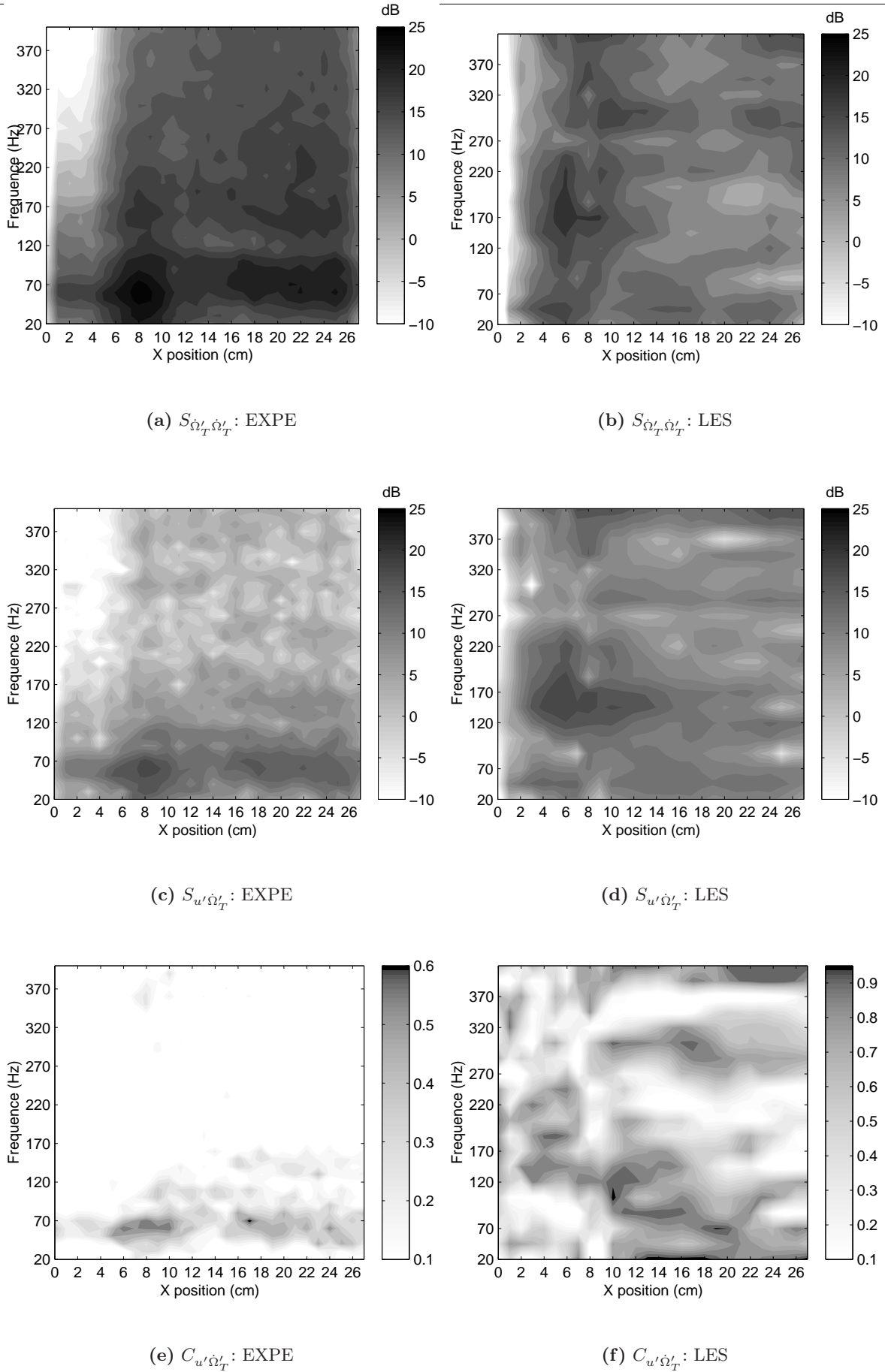


FIG. 7.13 – Fonction de cohérence $C_{u' \dot{\Omega}'_T}$, densité spectrale d'énergie $S_{\dot{\Omega}'_T \dot{\Omega}'_T}$, densité spectrale croisée $S_{u' \dot{\Omega}'_T}$ en fonction de la fréquence et de la position x dans la chambre. A gauche: expérience, à droite: LES.

7.3.3 Caractère tri-dimensionnel de la flamme

La composante transverse de la vitesse n'est pas négligeable, comme le montre la Fig. 7.10(c). Les Figs. 7.14 à 7.16 représentent des champs instantanés de la structure 3D de la flamme obtenus en LES. Sur la Fig. 7.14, une isosurface de température (800 K) coloriée par la richesse met en évidence les fortes variations de richesse des gaz pénétrant dans la zone de réaction. Sur la Fig. 7.15, une isosurface de propane est coloriée par le taux de dégagement de chaleur. Cet isosurface affiche une zone de réaction stabilisée loin des lèvres de l'injecteur. De forts niveaux de CO sont observés dans les gaz brûlés. D'autre part, dans la couche de mélange initiale, de larges structures cohérentes bidimensionnelles contrôlent la dynamique de l'écoulement et progressivement une transition vers la turbulence peut être observée avec l'apparition de petites structures. Ses structures influent sur le processus de mélange des réactifs, mais aussi sur la dynamique et la structure même de la flamme. Une vue plus claire des structures turbulentes est présentée sur la Fig. 7.16. Le critère Q [72] (voir Annexe A.1) est utilisé pour visualiser la vorticit . De large structures en forme de rouleaux sont pr sentes dans la couche de m lange, mais aussi au voisinage de l' largissement brusque o  elles interagissent avec la flamme stabilis e en aval. Les couches de m lange pr sentent des instabilit s de Kelvin-Helmholtz au fur et   mesure de leur d veloppement.

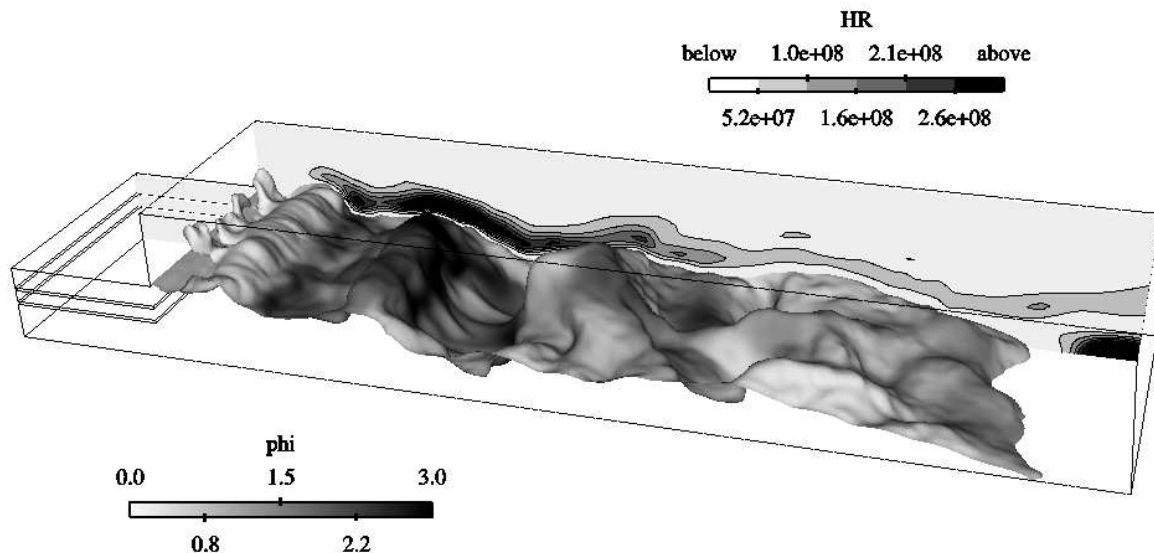


FIG. 7.14 – Champs instantan s obtenus en LES. Isosurface de temp rature (800 K) colori e par la richesse ϕ et contours du taux de d gagement de chaleur ($HR = \dot{\omega}_T$) pr s du mur.

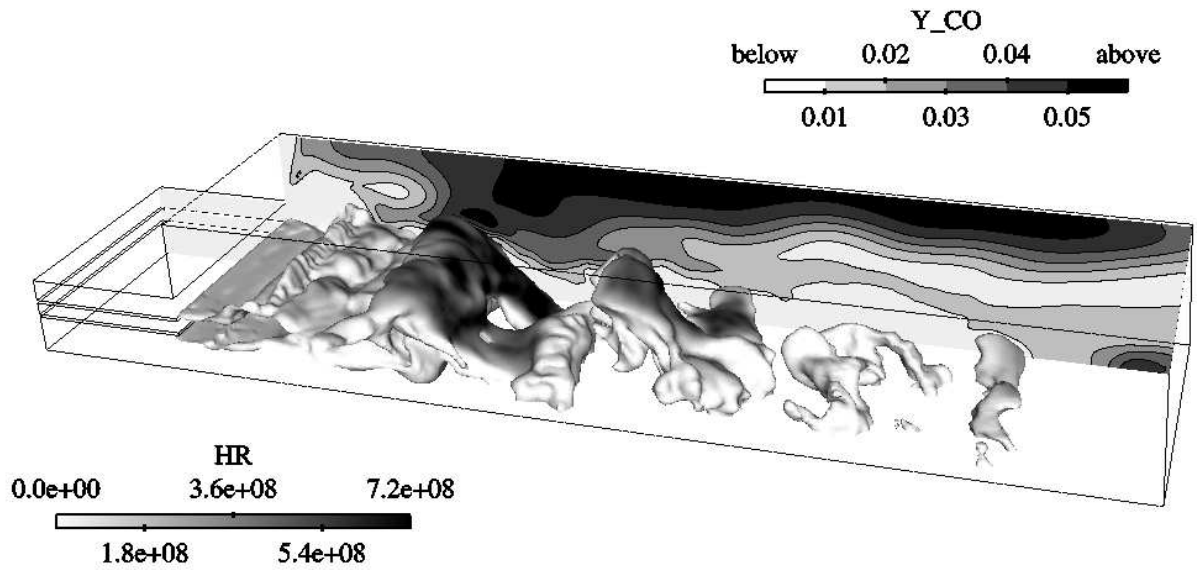


FIG. 7.15 – Champs instantanés obtenus en LES. Isosurface stœchiométrique de C_3H_8 ($Y_{C_3H_8} = 0.06$) coloriée par le taux de dégagement de chaleur ($HR = \dot{\omega}_T$ en $J.m^3.s^{-1}$) et contours de CO près du mur.

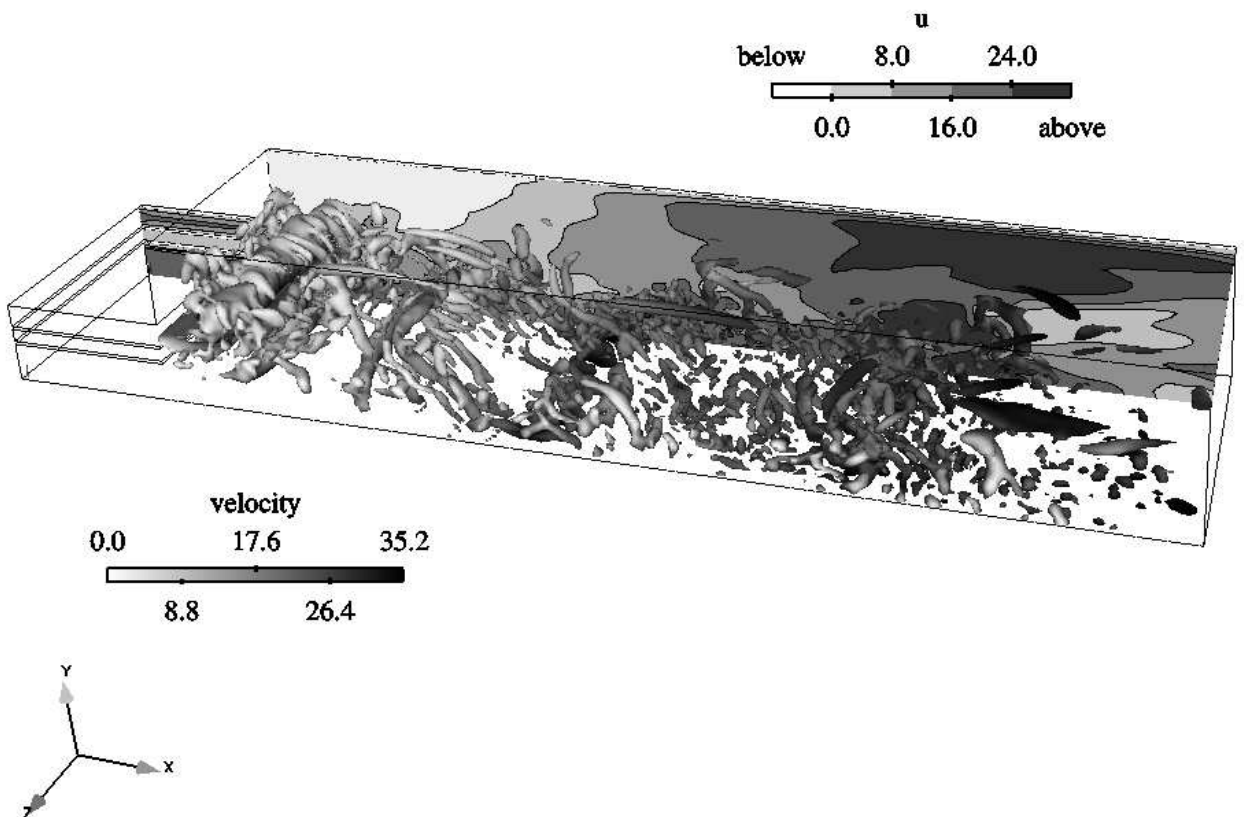


FIG. 7.16 – Champs instantanés obtenus en LES. Isosurface de vorticité coloriée par la vitesse (m/s) et contours de la vitesse axiale u près du mur.

7.4 Comparaisons avec l'expérience

Tout d'abord, la structure instantanée de la flamme est comparée à la PLIF simultanée sur OH et l'acétone. Pour vérifier le caractère tri-dimensionnel de l'écoulement, des coupes longitudinales et transverses ont été réalisées à l'aide de la fluorescence induite par nappe laser. Les champs expérimentaux de la fraction massique de propane, pour des températures inférieures à 1000 K, peuvent être ainsi au moins qualitativement comparés aux résultats numériques. La comparaison entre le radical OH et le taux de réaction n'est pas direct (section 6.2.3), car dans une flamme de prémélange OH est aussi présent dans les gaz brûlés: la position de la zone de réaction peut être obtenue en prenant le gradient du signal de OH du côté riche.

7.4.1 Vues longitudinales instantanées

Les vues sont positionnées dans le plan central (x,y) de la chambre à $z = 0.04$ m. Les Figs. 7.17(a,b,c) représentent la fraction massique de propane et les contours de OH obtenus expérimentalement en différents instants, tandis que les Figs. 7.17(d,e,f) représentent la fraction massique de propane et les contours du taux de réaction obtenus en LES pour différents instants. Bien que ces champs ne soient pas corrélés, la structure de flamme calculée en LES est comparable aux visualisations expérimentales. La position de la flamme prédite par la LES est proche de celle observée expérimentalement. Le mélange commence en aval du plan d'injection ($x = 0$) conduisant à une décroissance rapide de la fraction massique de C_3H_8 . Lorsque les réactifs sont suffisamment mélangés et réchauffés par les gaz brûlés recirculant, la réaction démarre. Ce mécanisme se produit à proximité du point de stagnation derrière la marche.

7.4.2 Vues transverses instantanées

La fluorescence induite par laser a été appliquée dans la direction transverse pour caractériser le mélange et le comportement de la flamme dans la troisième direction. La Fig. 7.18 présente l'évolution du signal de OH (a) et du mélange (b) à trois abscisses différentes ($x = 10, 50$ et 150 mm) dans la chambre. Pour des comparaisons qualitatives, le taux de dégagement de chaleur et la fraction massique de propane obtenus en LES sont données sur les Figs. 7.19(a) et 7.19(b) respectivement. Sur la Fig. 7.18, les coupes à 10 mm du plan d'injection montrent que la couche de mélange près des injecteurs est presque bi-dimensionnelle: seules des petites structures transverses de fréquences caractéristiques élevées peuvent être observées. De plus, à cette abscisse le signal de OH n'est pas encore présent. A $x = 50$ mm, la couche de mélange et le

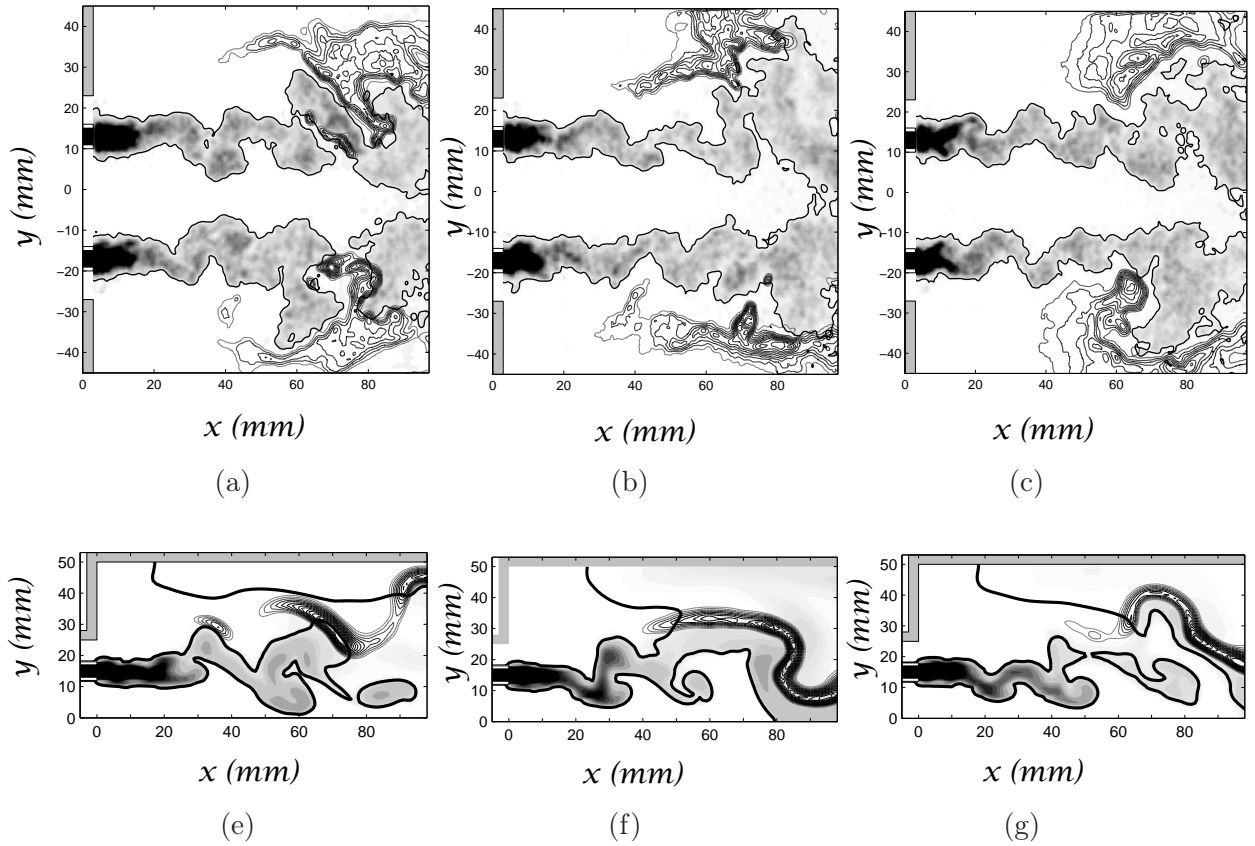


FIG. 7.17 – Première série: (a,b,c) Champ de la fraction massique de propane, ligne stœchiométrique $z = z_{st}$ (trait gras) et contours de OH obtenus par PLIF. Seconde série: (e,f,g) Champ de la fraction massique de propane, ligne stœchiométrique $z = z_{st}$ (bold line) et taux de dégagement de chaleur obtenus en LES.

signal de fluorescence de OH présente des structures 3D remarquables. Au milieu de la chambre ($x = 150$ mm), il ne reste plus de propane et la turbulence est complètement développée.

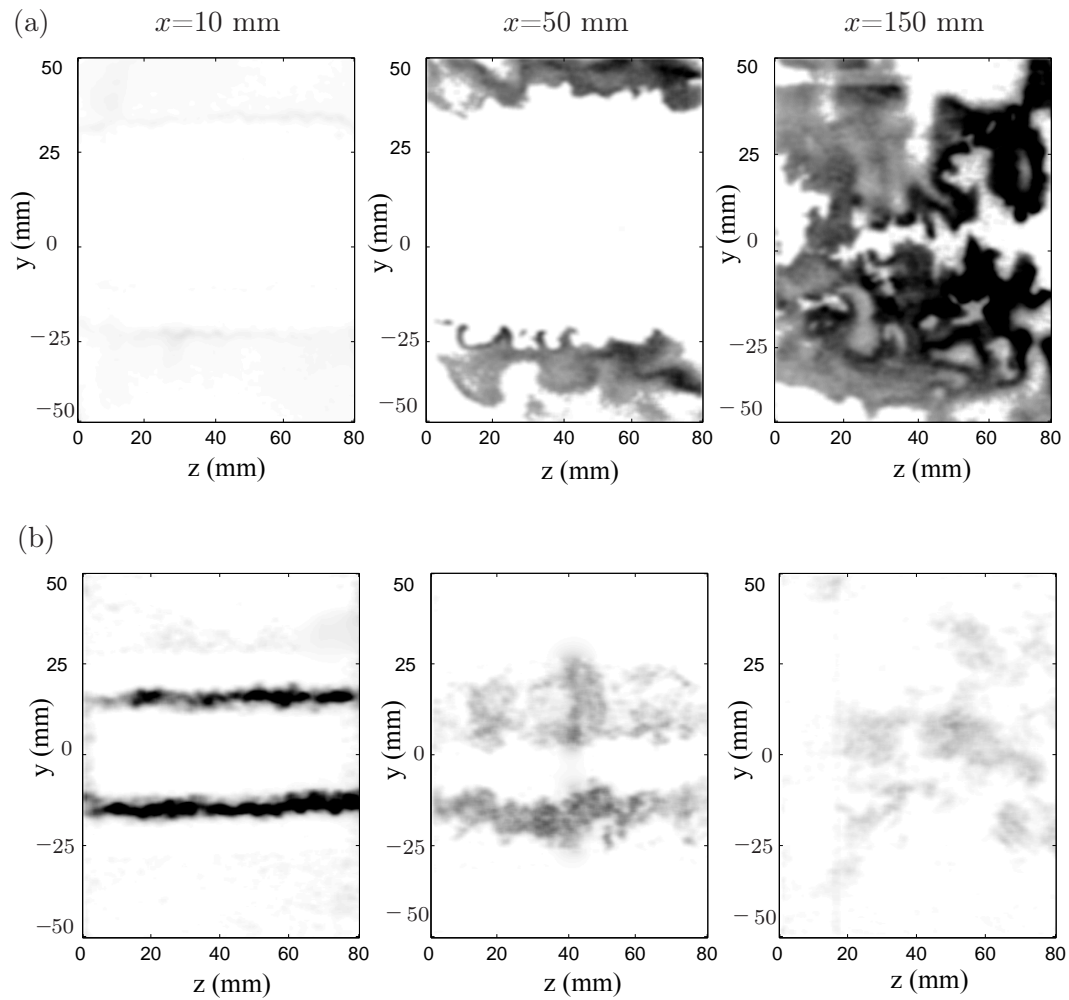


FIG. 7.18 – Evolution spatiale de l'écoulement dans le plan transverse obtenue par PLIF simultanée du radical OH et de l'acétone. Première série (a): signal de fluorescence de OH, seconde série (b): fraction massique de propane.

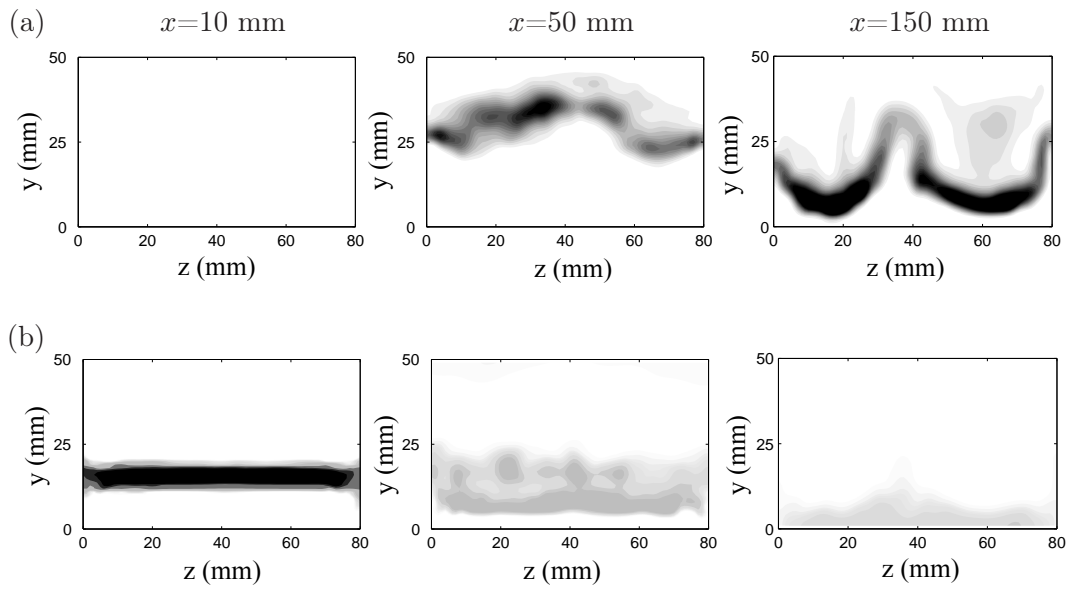


FIG. 7.19 – Evolution spatiale de l'écoulement dans le plan transverse obtenue par le calcul LES de la moitié supérieure de la chambre de combustion. Première série (a): taux de dégagement de chaleur, seconde série (b): fraction massique de propane.

7.4.3 Champs moyens

Dans cette section, les résultats numériques sont moyennés sur 43 ms correspondant environ à 3 temps convectifs dans la chambre.

Position moyenne de la flamme

Le premier point de comparaison est la position de la flamme: la prédiction du point de stabilisation de la flamme a fait l'objet de nombreuses études [10,64,128,109,153]. Pour le régime de flamme décrochée au point B, la combustion ne démarre pas aux lèvres des injecteurs de propane mais loin derrière. Sa position peut être visualisée:

- en traçant le taux de dégagement de chaleur moyen dans la chambre (moyenné en temps et spatialement selon la direction transverse) obtenu numériquement. Ce signal est comparé à la chimiluminescence du radical CH obtenu expérimentalement. La comparaison du taux de dégagement de chaleur moyen et de l'émission moyenne de CH^+ (Fig. 7.20) montre que la forme de la flamme prédite par la LES est globalement en bon accord avec les résultats expérimentaux. Néanmoins quelques différences peuvent être observées. L'émission du radical CH s'étale presque sur toute la longueur de la chambre, alors que la flamme numérique présente un fort dégagement de chaleur près du point de stabilisation. De plus, la zone réactive semble stabilisée plus loin des injecteurs dans l'expérience que dans le calcul numérique. Ces différences peuvent provenir de la relation non linéaire entre l'émission de CH et le dégagement de chaleur dans une flamme partiellement prémélangée. D'autre part, l'émission de CH est relativement faible dans la zone d'accrochage de la flamme et très importante dans le reste du foyer. Le dispositif expérimental utilisé a été calibré par rapport aux valeurs maximales d'émissions CH pour ne pas recueillir un signal saturé. L'émission CH de la flamme dans la zone d'accrochage est alors peut-être trop faible pour être capté avec un tel réglage du dispositif expérimental. On notera que la zone réactive semble moins étalé en hauteur que dans le cas d'un calcul 2D (Fig. 7.4), tout simplement parce que la zone réactive est intégrée spatialement et que près des parois elle est moins sensible à l'instabilité hydrodynamique qui provoque son battement vertical.
- en comparant la vitesse axiale moyenne conditionnée par les gaz frais (PIV), la fraction massique de propane moyenne (PLIF) et le signal moyen normalisé de OH (PLIF) avec les champs correspondants en LES. La Fig. 7.21 compare les trois champs obtenus numériquement et expérimentalement: la combustion ne démarre pas aux lèvres de l'injecteur et la LES capture cet effet. La répartition des vitesses conditionnées dans les gaz frais et de la

fraction massique de propane est correctement prédite par le calcul. La répartition de la réaction semble aussi correctement prédite.

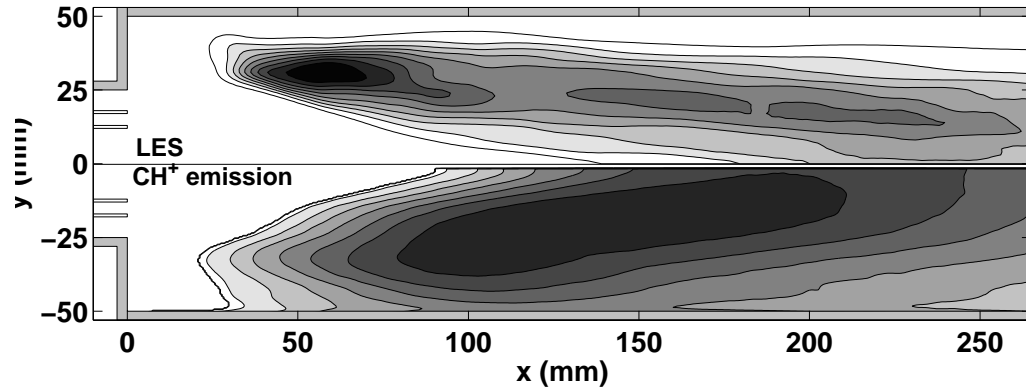
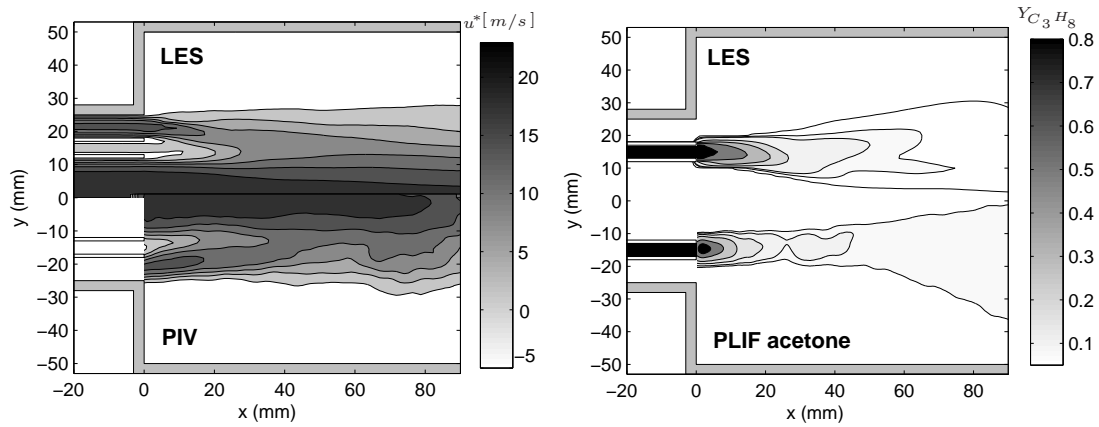


FIG. 7.20 – Comparaison du taux de dégagement de chaleur moyen $\dot{\omega}_T$ et de l'émission moyenne de CH^+ .

L'analyse de gaz et la vélocimétrie

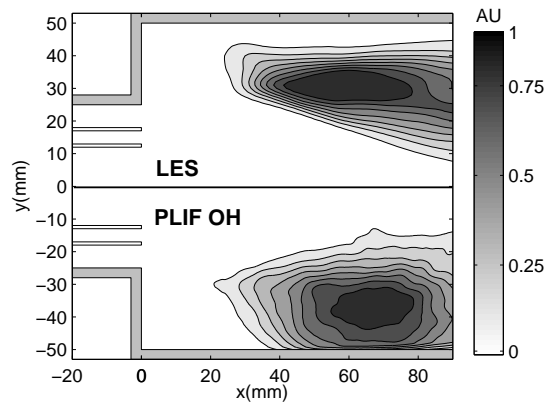
Les niveaux de C_3H_8 , O_2 , CO_2 et CO prédits par la LES sont comparés aux résultats obtenus expérimentalement. Des profils verticaux sont extraits des mesures et des calculs à trois abscisses différentes dans le plan central de la chambre de combustion (Fig. 7.22). Nous observons que les gaz de la zone de recirculation ($y \geq 30$ mm) sont essentiellement composés des produits de la combustion (CO , CO_2). Le mélange entre les produits chauds et les réactifs partiellement prémélangés amenés vers la zone de recirculation induite par l'expansion rapide contribue à la stabilisation de la flamme dans la chambre de combustion. Les comparaisons entre les résultats numériques et expérimentaux sont satisfaisantes. Les différences observées pour le propane au milieu de la chambre ($x = 110$ mm) sont corrélées aux analyses faites dans le paragraphe précédent. En effet, le taux de consommation du propane est surestimé au début de la zone réactive, conduisant à un défaut de propane vers le milieu de la chambre. Les divergences observées pour CO et CO_2 vers la sortie du brûleur ($x = 290$ mm) résultent de la légère différence sur la position de stabilisation de la flamme, mais aussi sur les limitations du schéma cinétique.

Pour avoir d'autres comparaisons quantitatives, quelques profils verticaux sont extraits du champ de vitesse axiale moyenne conditionnée par les gaz frais $\overline{u^*}$ à partir de la Fig 7.21 et tracés sur la Fig 7.23. Les valeurs numériques et expérimentales sont très proches excepté dans le sillage des injecteurs de propane ($0 \text{ mm} < y < 20 \text{ mm}$) où les particules d'huiles ne sont pas présentes.



(a) axial velocity u^*

(b) C_3H_8 mass fraction



(c) $\dot{\omega}_T$ (top)/OH radical (bottom)

FIG. 7.21 – Comparaison des champs moyens obtenus en LES et dans l'expérience près de la zone de stabilisation de la flamme.

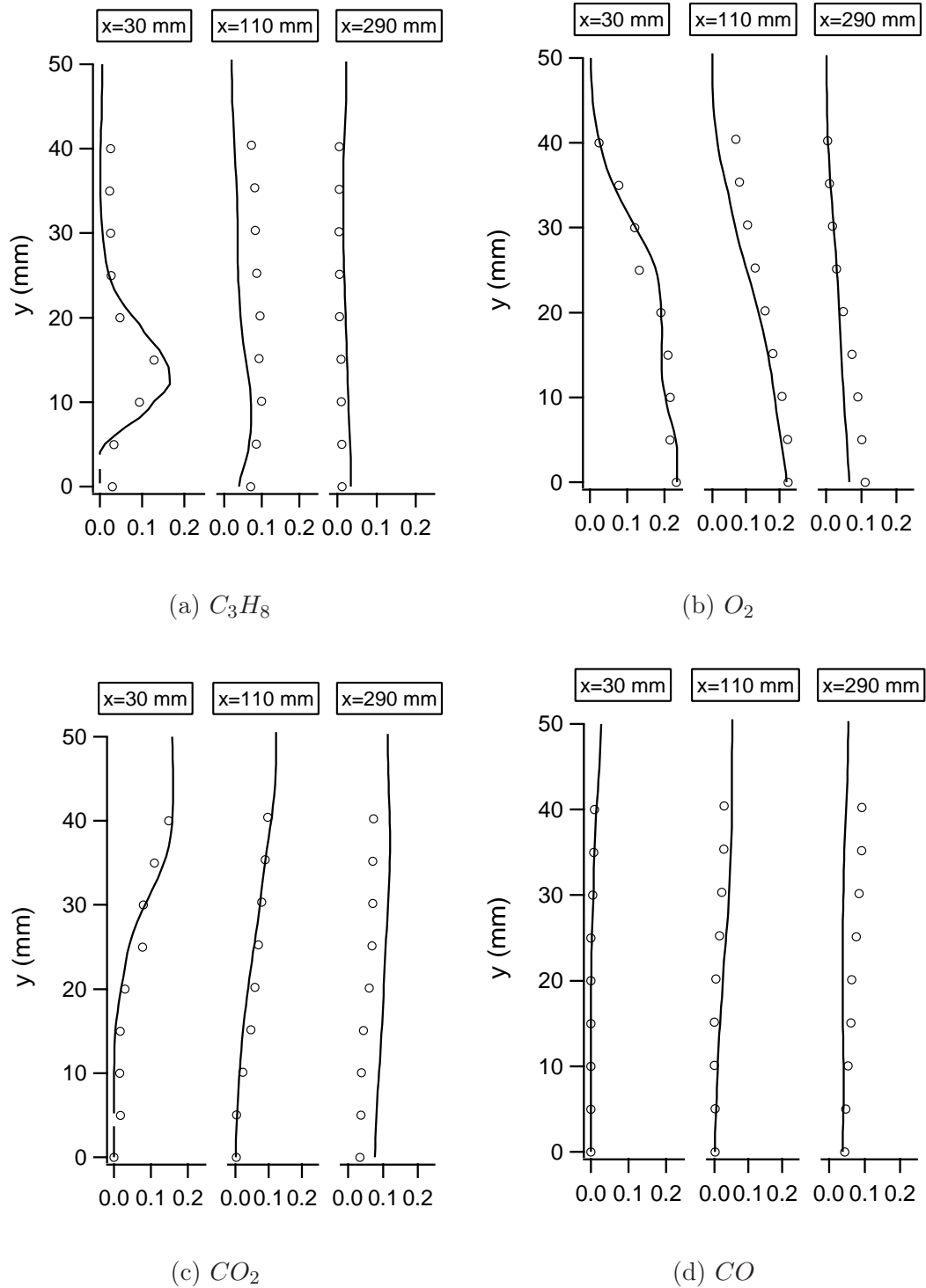


FIG. 7.22 – Profils de fractions massiques: analyseur de gaz multi-composants FT-IR (o) et LES (—)

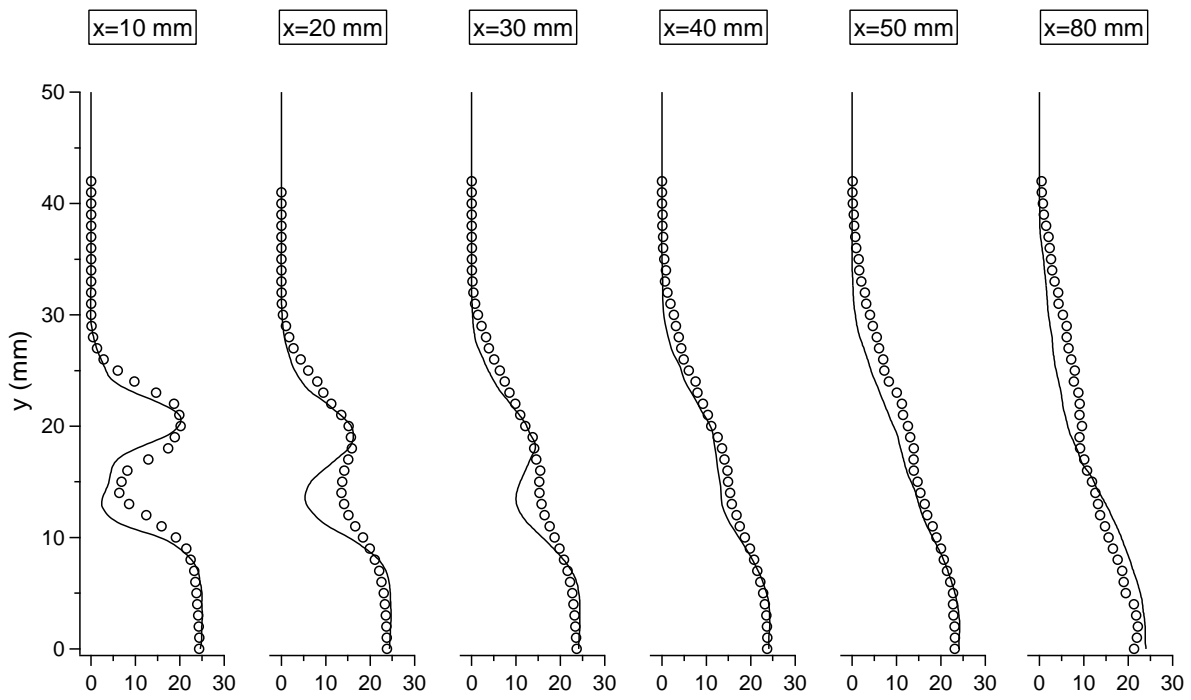


FIG. 7.23 – vitesse axiale conditionnée $\overline{u^*}$ (m/s), expérience (\circ) et LES ($-$).

Chapitre 8

Résultats avec excitation

8.1 Réponse de la flamme et du mélange à l'excitation acoustique

Dans une couche de mélange, la perturbation qui provoque la formation de rouleaux tourbillonnaires est plus ou moins aléatoire dans le temps. Dans une couche de mélange excitée, la fréquence f de la perturbation correspond à la fréquence du forçage. L'excitation périodique de l'écoulement va générer ces structures. Le temps séparant chaque lâché de tourbillon n'est plus aléatoire, mais il vaut $1/f$ et les structures cohérentes ont à peu près la même taille. Le comportement de la couche de mélange soumise à une excitation acoustique a été examiné sans combustion [70,126]. Lorsqu'il existe plusieurs couches de mélange, il faut prendre en compte les couplages entre les couches de mélange dans les mécanismes d'instabilité du jet. Ho et Huang [Ho,1982] ont développé une théorie pour classer les structures observées suivant des modes qui correspondent à différentes fréquences de détachement tourbillonnaire dans la zone initiale. La formation de structures tourbillonnaires est la principale caractéristique d'une couche de mélange.

Le mécanisme de détachement tourbillonnaire n'est pas étudiée dans cette thèse, mais il est important de souligner que la formation de ces vortex est très sensible aux conditions aux limites. Il est primordial que la simulation numérique reproduise les conditions aux limites de l'expérience, en particulier le profil de vitesse à l'entrée de la chambre. De même, si l'impédance acoustique aux bords est modifiée, la dynamique du lâché de vortex risque d'être aussi modifiée.

8.1.1 Analyse des champs instantanés

La structure de la flamme et la dynamique du mélange sont analysées à différentes phases d'une période acoustique (la fréquence d'excitation est fixée à 350 Hz). Des coupes transverses et longitudinales (Fig. 8.1) sont utilisées pour caractériser les interactions entre la flamme, le mélange et la vorticit  dans les deux plans. Dans le cas pr sent le crit re λ_2 est utilis  pour d tecter les structures coh rentes dans les zones de cisaillement [74] (voir Annexe A.2). Comme on peut le visualiser sur les coupes longitudinales, le lâcher de vortex est un m canisme important dans le m lange des r actifs. Du fait de la faible vitesse du jet de propane, des structures coh rentes contra-rotatives sont cr ees de part et d'autre de l'injecteur de propane, amenant ainsi de l'air dans l' coulement de propane. La distance de p n tration du jet de fuel identifi  par la ligne st chiom trique s'accro t progressivement avec le temps, surtout pour $180^\circ < \phi_u < 330^\circ$, lorsque la fluctuation de vitesse   l'entr e devient n gative. De forts niveaux de turbulence pr s du point de stabilisation de la flamme ($x \approx 50$ mm), lorsque $\phi_u > 180^\circ$, intensifient le m lange et favorisent ainsi la r action   cet endroit. Durant tout le cycle, la position de stabilisation de la base de la flamme ne change pas significativement. En effet, cette position d pend surtout de la dynamique

basse fréquence du point de stagnation derrière la zone de recirculation, qui est peu affecté par la fréquence de pulsation plus élevée. L'effet de l'excitation acoustique sur la dynamique de la flamme est particulièrement évidente entre 50 et 100 mm. Dans cette région, le mouvement de la flamme est caractérisé par un battement vertical provoqué par les fluctuations cycliques de la vitesse. Au cours de la phase d'accélération du cycle, la flamme turbulente ne peut pas se propager vers les injecteurs alors que pendant la phase de décélération, la flamme peut se plisser vers l'axe de symétrie.

Les coupes transverses (Fig. 8.1) mettent en évidence la présence de perturbations 3D dans l'écoulement dus à la transition vers la turbulence. Cependant à $x = 60$ mm, la flamme a encore une structure 2D. A $\phi_u = 60^\circ$, deux langues générés par de la vorticit  negative amène le propane vers le centre de la chambre de combustion alors qu'à $\phi_u = 240^\circ$, les structures de vorticit  positive pr s des murs repoussent des poches d'air vers le fuel.

De la m me fa on que dans le cas non excit , l'effet de l'excitation acoustique peut  tre aussi analys  en comparant le signal temporel du taux de d gagement de chaleur global obtenu avec la LES $\dot{\Omega}_T(t) = \int_V \dot{\omega}_T(t) dv$ avec le signal d' mission de CH^+ int gr  dans la chambre. La transform e de Fourier de ces quantit s est obtenue apr s 20 cycles, permettant une r solution spectrale de $\Delta f = 1/t = 350/20 \approx 18$ Hz. Les graphes sont pr sent s sur la Fig. 8.2. On peut visualiser le pic   350 Hz correspondant   la r ponse de la flamme   l'excitation acoustique. Les deux autres fr quences apparaissent nettement autour de 85 Hz et 170 Hz et sont proches des fr quences observ es dans le cas non excit e.

Les champs instantan s nous permettent de visualiser la dynamique du m lange et de la flamme soumis   une excitation acoustique. Des tendances g n rales et des comparaisons qualitatives avec les r sultats exp rimentaux sont possibles   l'aide des moyennes de phases.

8.2 Moyennes de phases

Dans cette section, les r sultats LES sont moyenn s sur 25 cycles correspondant   un temps physique de 71 ms (environ 5 temps convectifs). D'un point de vue exp rimental, les mesures PIV et PLIF sur OH/ac tone sont moyenn es sur le m me nombre de cycles. Les diagnostics PIV et PLIF n'ont pas  t  obtenus simultan ment mais dans les m mes conditions op ratoires, avec une amplitude de pulsation identique et le m me temps de r f rence pour l'identification des phases. Les r sultats exp rimentaux et LES sont compar s en terme de vitesse moyenne conditionn e $\overline{u^*}$, de fraction massique de propane Y_f et de position moyenne de la flamme sur les Figs. 8.3

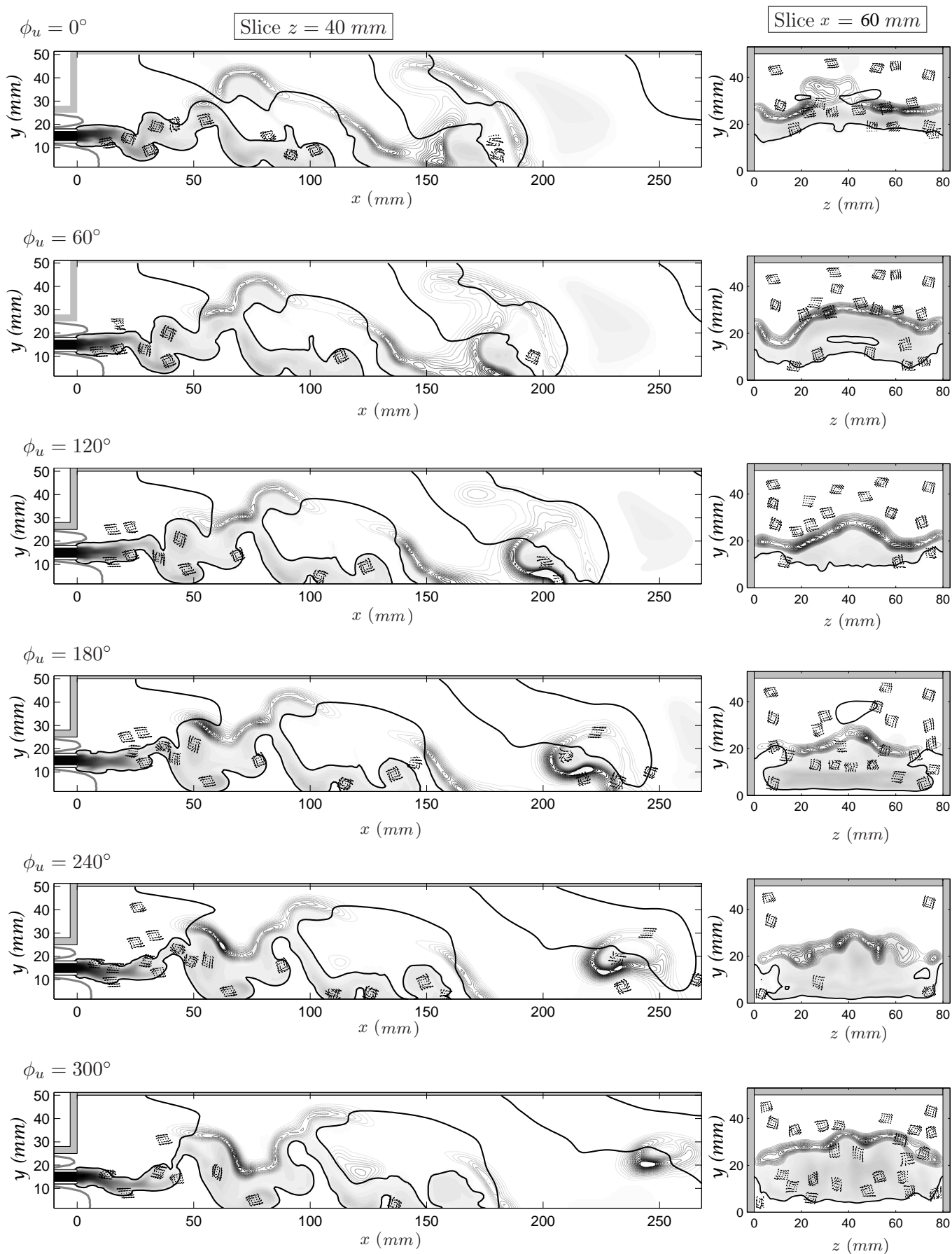


FIG. 8.1 – Flamme, mélange et distribution des structures cohérentes pendant une période acoustique (LES). Ligne stœchiométrique (—), contours du taux de dégagement de chaleur, indice de mélange $Y_f * Y_o$, structures cohérentes avec $D_c = 3 \text{ mm}$ (→), profil de vitesse à l'entrée (—).

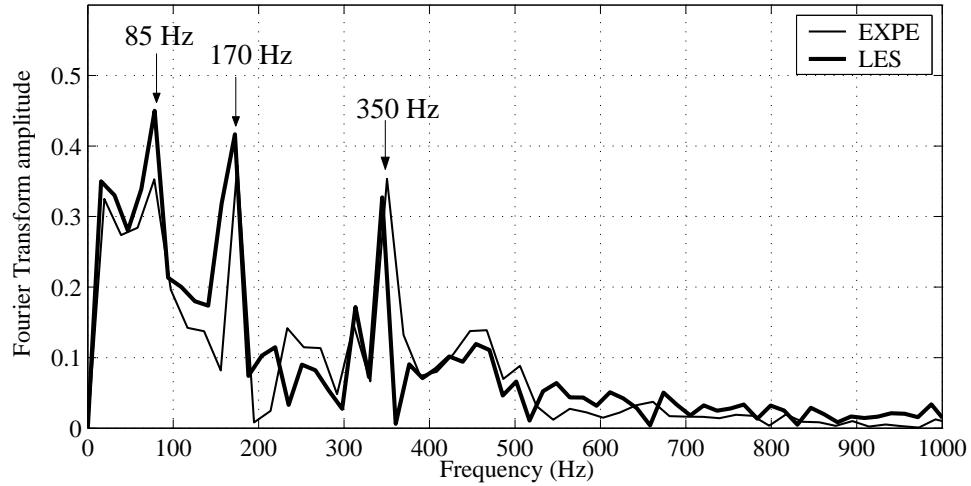


FIG. 8.2 – Transformées de Fourier du taux de dégagement de chaleur global $\dot{\Omega}_T(t)$ obtenu avec la LES et du signal d'émission global de CH^+ .

et 8.4. La pulsation provoque une accélération de la vitesse dans l'écoulement d'air, clairement visible sur l'axe de symétrie. Ces poches d'air convectées vont moduler le mélange des réactifs et générer des fluctuations du taux de dégagement de chaleur. Les frontières du champ de vitesse conditionnée présentent les mêmes oscillations entre la LES et les mesures PIV. La LES reproduit correctement les interactions entre l'acoustique et la dynamique de l'écoulement, ainsi que les fluctuations de l'isotherme $T = T^*$. Les champs de fractions massiques sont complémentaires de la zone réactive et mettent en évidence l'influence des variations cycliques de la richesse. Les variations spatiales de la couche de mélange sont correctement reproduites par la simulation numérique. Dans une flamme de prémélange partiel, le côté riche du signal de fluorescence de OH est proche de la zone de réaction et peut être approximativement comparé aux frontières de $\dot{\omega}_T$. Cette propriété nous permet de vérifier que la réponse de la flamme à l'excitation acoustique est bien reproduite.

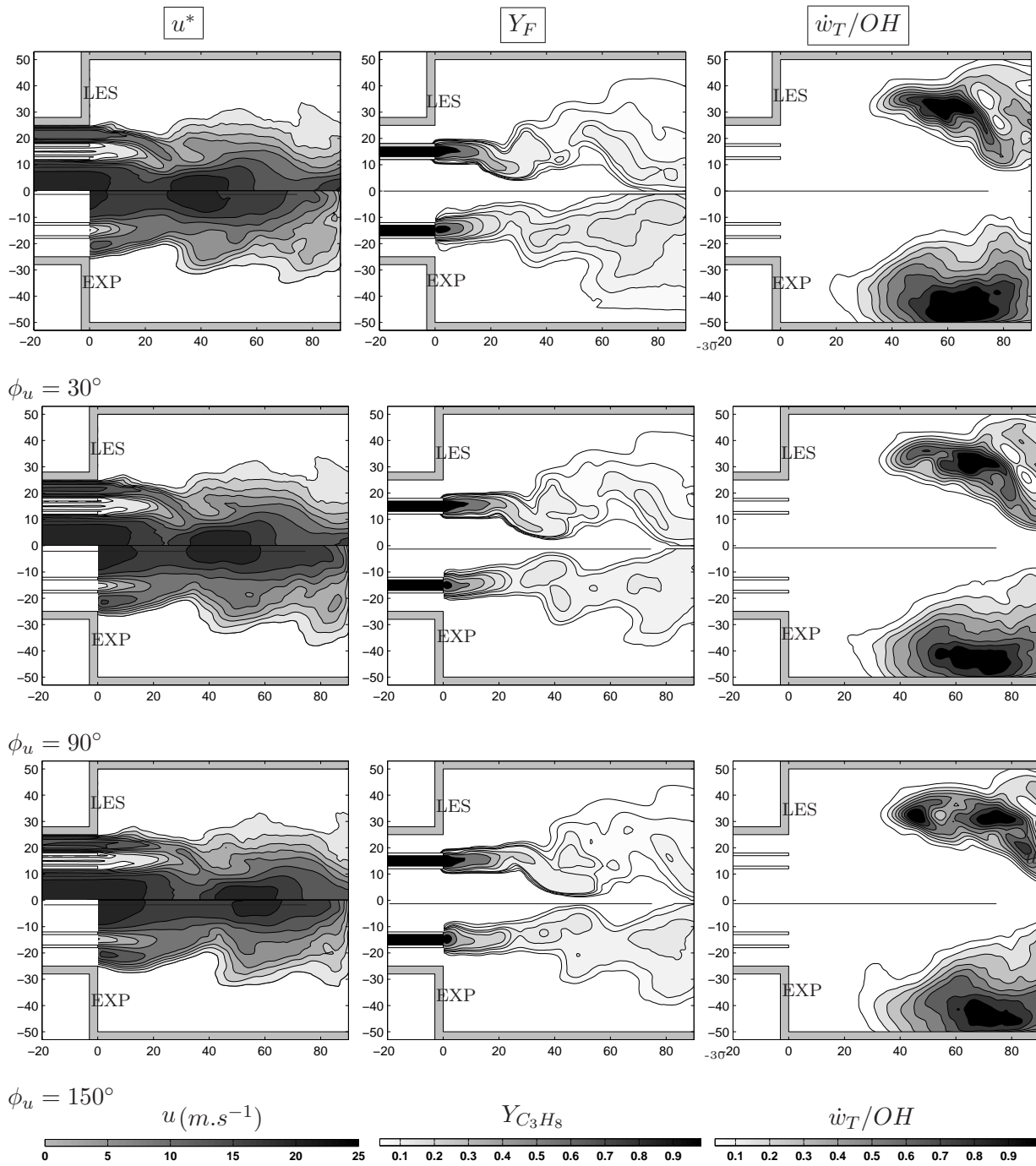


FIG. 8.3 – Evolution de la flamme liftée sous excitation acoustique (350 Hz). Comparaison des moyennes de phases entre la LES (moitié supérieure) et l'expérience (moitié inférieure). A gauche: vitesse axiale conditionnée \bar{u}^* , au milieu: fraction massique de C_3H_8 , à droite: \dot{w}_T (en haut)/ OH radical (en bas).

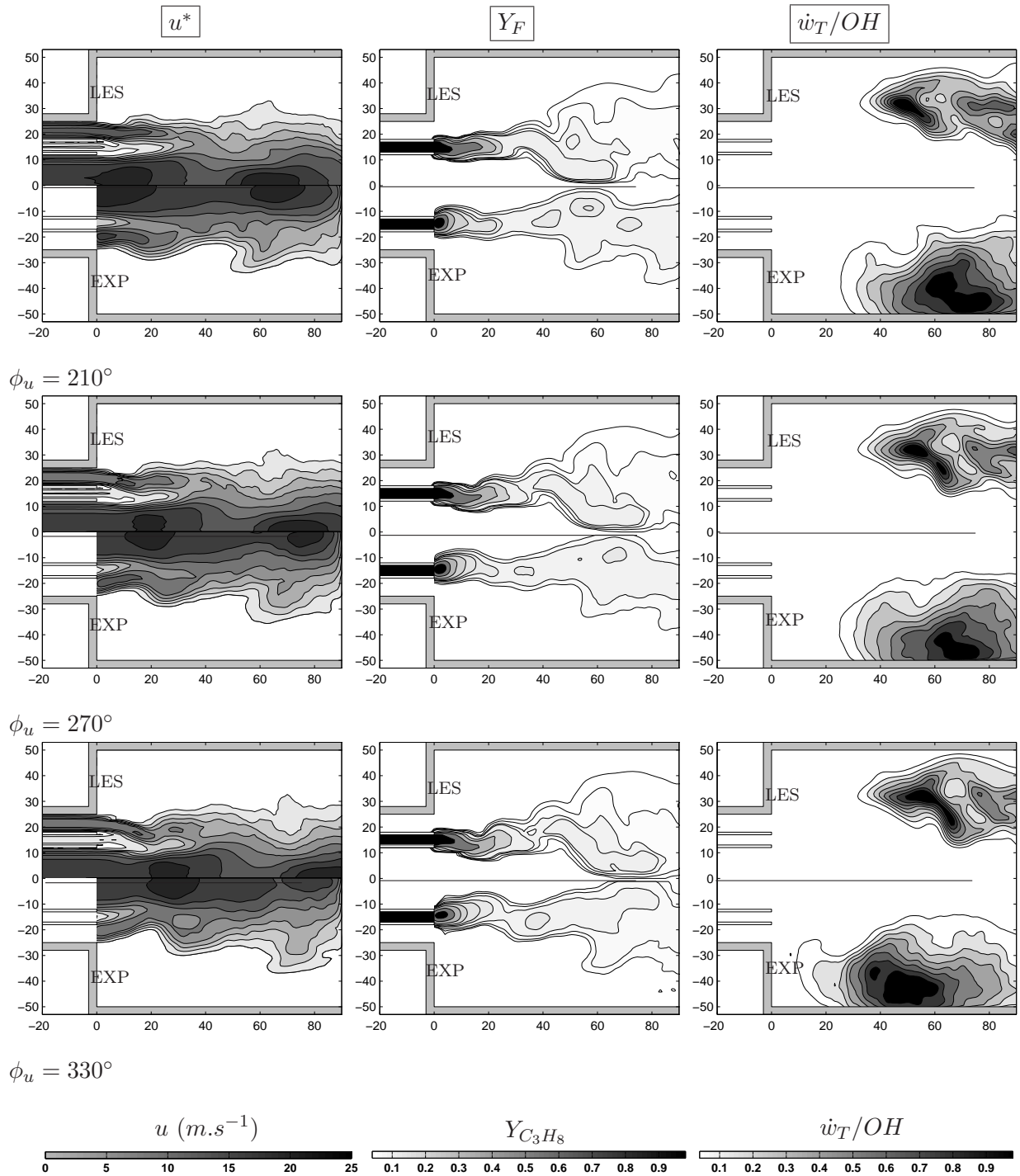


FIG. 8.4 – Evolution de la flamme liftée sous excitation acoustique (350 Hz). Comparaison des moyennes de phases entre la LES (moitié supérieure) et l'expérience (moitié inférieure). A gauche: vitesse axiale conditionnée \bar{u}^* , au milieu: fraction massique de C_3H_8 , à droite: à droite: $\dot{\omega}_T$ (en haut)/ OH radical (en bas).

8.3 Fonction de transfert de la flamme

Les données expérimentales disponibles ne nous permettent pas d'utiliser les techniques ITM ou FTF étendues (partie II). Nous comparons donc les résultats LES et expérience en terme des paramètres du modèle $n - \tau$ classique. Pour vérifier la cohérence des résultats, nous étudions en premier lieu, l'influence des conditions acoustiques aux limites sur les valeurs de n et de τ obtenus par les calculs.

8.3.1 Influence du coefficient de réflexion

Les valeurs de n et τ sont tracées pour 3 valeurs du coefficient de réflexion en sortie du domaine: $R = 0.13$, $R = 0.3$ et $R = 0.6$ (Figs. 8.5 et 8.6). Les simulations numériques ont été réalisées avec un maillage 2D. Aucun autre paramètre n'est modifié. Pourtant on observe des différences significatives entre chacun des cas:

- Globalement, plus le coefficient de réflexion est élevé et plus la cohérence est mauvaise (Fig. 8.7). Cela s'explique par le fait que la condition en sortie se comporte comme un filtre passe-bas acoustique. En effet, lorsque le coefficient de relaxation est nul, il n'y a aucune réflexion et toutes les ondes acoustiques peuvent s'échapper du domaine. Lorsque R augmente, les plus grandes longueurs d'ondes vont être réfléchies dans le domaine et si R augmente encore, la limite de longueurs d'ondes des ondes réfléchies va diminuer. Ces perturbations acoustiques vont générer du bruit dans le signal du taux de réaction et donc la cohérence va diminuer.
- Pour les cas $R = 0.13$ et $R = 0.6$, les niveaux de cohérence sont comparables et pourtant les valeurs de n sont très différentes en particulier au fond de la chambre.
- Les temps de retards τ présentent aussi des différences, lorsque la cohérence est satisfaisante.

Ces résultats confirment encore une fois, que les méthodes FTF ne sont pas applicables dans ce cas, à moins de connaître et de pouvoir reproduire les conditions aux limites acoustiques de l'expérience, ce qui n'est pas le cas. Cependant, il peut être intéressant de comparer les résultats obtenus avec une simulation 2D et ceux obtenus avec la simulation 3D. Les simulations 2D réalisées avec les plus faibles coefficient de relaxation fournissent des signaux plus cohérents. Pour cette raison, nous imposons sur les conditions aux limites de la configuration 3D, les coefficients de réflexion les plus faibles possibles, avant de comparer la LES 3D aux valeurs expérimentales.

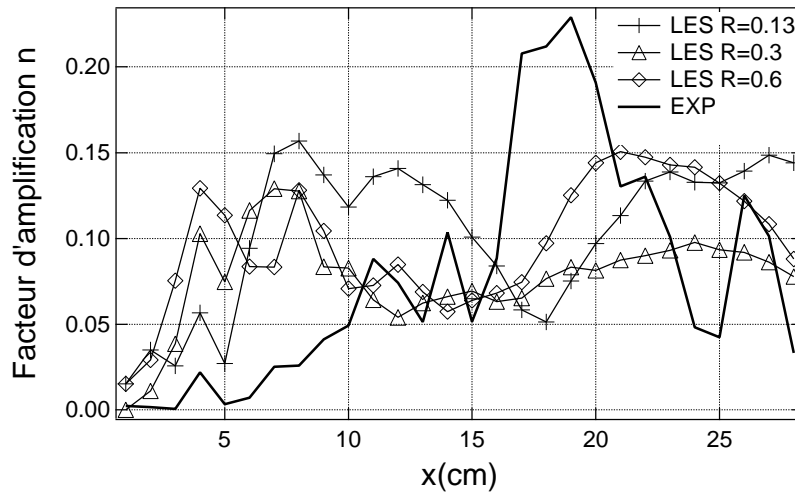


FIG. 8.5 – Facteur d’amplification n en fonction de l’abscisse du brûleur pour différentes valeurs du coefficient de réflexion en sortie du domaine.

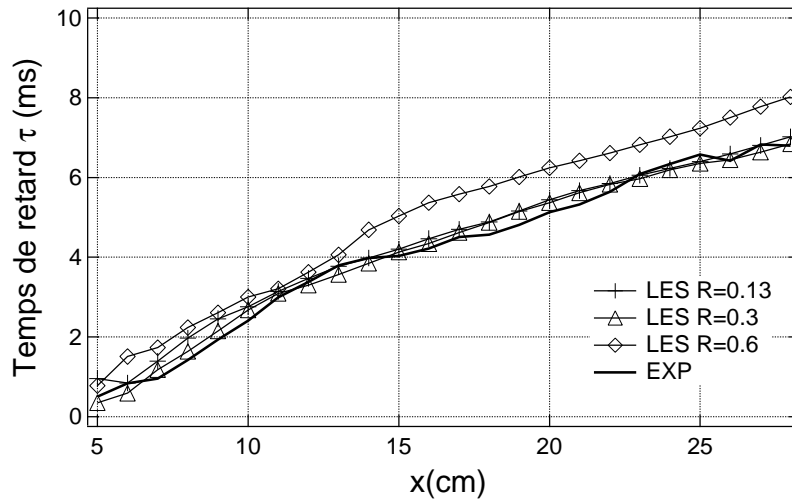


FIG. 8.6 – Temps de retard τ (en ms) en fonction de l’abscisse du brûleur pour différentes valeurs du coefficient de réflexion en sortie du domaine.

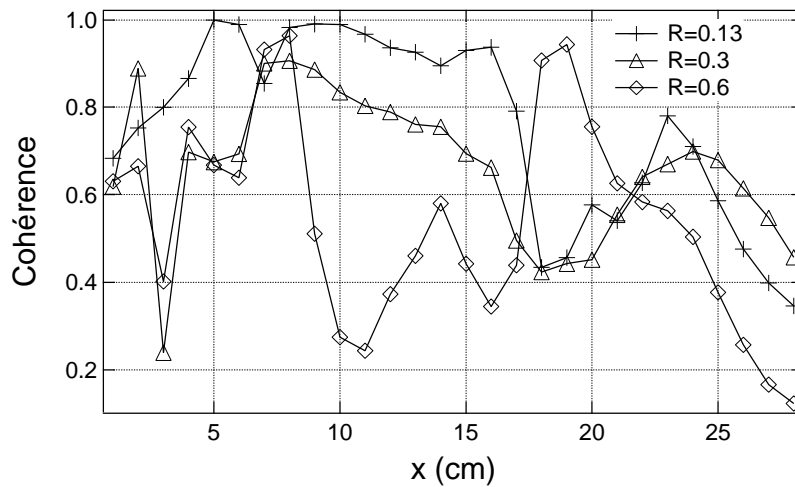


FIG. 8.7 – Cohérence entre le signal de vitesse (mesuré au point P_1) et le taux de dégagement de chaleur (mesuré dans chaque tranche située entre les abscisses $x = 0$ et $x = 28$ cm du brûleur) pour différentes valeurs du coefficient de réflexion en sortie du domaine.

8.3.2 Comparaison avec l'expérience

Les indices n et τ sont tracés en fonction de l'abscisse pour la fréquence d'excitation 350 Hz (Figs. 8.8 et 8.9). Pour vérifier la qualité des résultats, la fonction de cohérence entre u' et $\dot{\Omega}'_T$ est donnée sur la Fig. 8.10. Les résultats expérimentaux sont obtenus après 100 cycles acoustiques, ce qui explique l'excellente cohérence des signaux. Les résultats LES sont obtenus après 20 cycles acoustiques de temps simulé. On constate que la cohérence est mauvaise jusqu'à 4 cm, car il n'y a pas encore de flamme. La cohérence est bonne dans le premier tiers de la chambre, ensuite elle diminue progressivement. En effet, le signal périodique est de plus en plus "noyé" par le bruit généré par l'écoulement turbulent au fur et à mesure que l'on s'éloigne de la source acoustique. Les différences entre les facteurs d'amplification numériques et expérimentaux sont à rapprocher de celles constatées dans la section 7.4.3: au niveau de la zone de stabilisation de la flamme ($50 \text{ mm} < x < 100 \text{ mm}$), la réponse de la flamme obtenue par la simulation est surestimée par rapport à l'expérience alors qu'elle est sous-estimée dans la deuxième moitié de la chambre. On constate qu'il existe un très bon accord pour le déphasage τ . On observe deux tendances: dans la première moitié du brûleur, il suit la droite dont la pente correspond au temps convectif dans les gaz frais. Les perturbations du taux de réactions induites par les oscillations de vitesses se propagent à la vitesse de l'écoulement, soit environ 25 m/s. Dans la deuxième partie du brûleur, la pente correspond au temps convectif moyen dans les gaz brûlés (avec une vitesse d'environ 40 m/s). On peut donc en déduire que les perturbations entraînant une modification du taux de réaction sont convectées par l'écoulement moyen.

Pour comparaison, les valeurs obtenues avec une simulation 2D, ayant des conditions aux limites semblables au cas 3D, sont données sur les Figs. 8.8 à 8.10. Les résultats ne changent pas significativement entre la LES 2D et 3D.

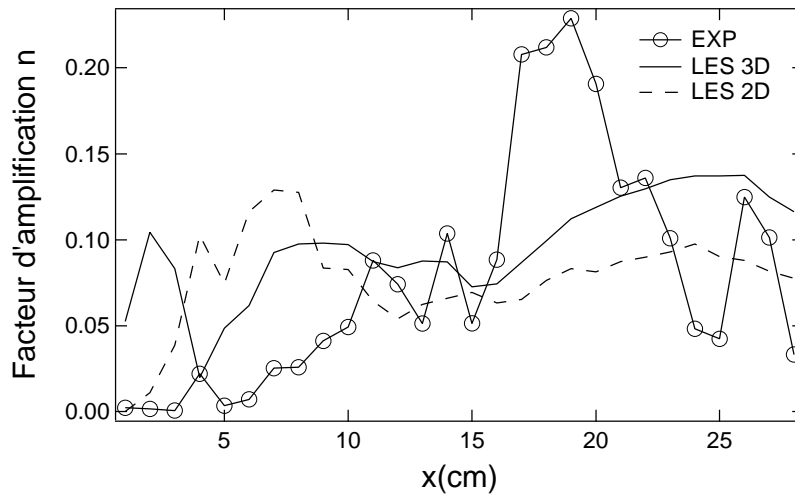


FIG. 8.8 – Facteur d'amplification n en fonction de l'abscisse du brûleur (distance par rapport au plan d'injection).

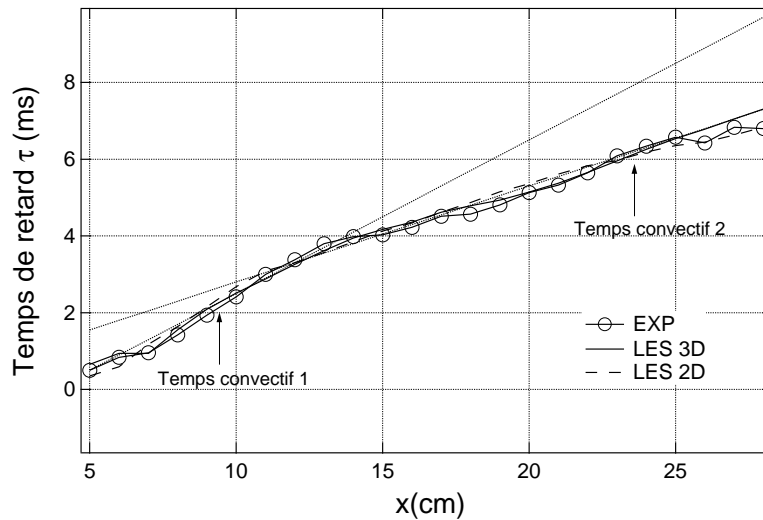


FIG. 8.9 – Temps de retard τ (en ms) en fonction de l'abscisse du brûleur (distance par rapport au plan d'injection).

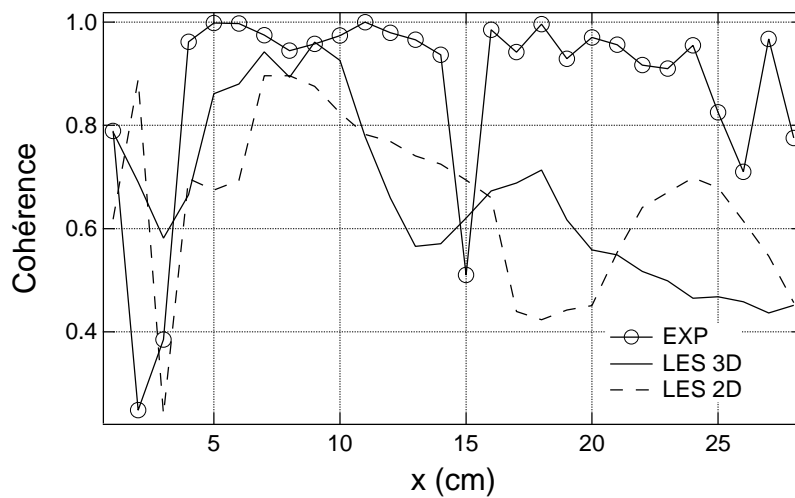


FIG. 8.10 – Cohérence entre le signal de vitesse (mesuré au point P_1) et le taux de dégagement de chaleur (mesuré dans chaque tranche située entre les abscisses $x = 0$ et $x = 28$ cm du brûleur).

8.3.3 Application aux techniques ITM et FTF étendues

La section 8.3.1 montre que la fonction de transfert de la flamme obtenue avec le modèle $n - \tau$ dépend des conditions aux limites. Dans la section 5.5 de l'article (chapitre 5), une méthode est proposée pour déterminer une fonction de transfert qui soit indépendante des impédances aux bords du domaine: les FTF étendues. Le modèle $n - \tau$ étendu est appliqué au brûleur ICLEAC. Pour des raisons de coût de calcul, l'application est réalisée sur un maillage 2D. La méthodologie employée pour obtenir les coefficients de la fonction de transfert (A_p , A_u , τ_p et τ_u) est décrite en détail dans la partie II. Le Tableau 8.1 décrit les deux cas tests utilisés pour la comparaison. Chaque cas test est composé de deux calculs pulsés (l'un est pulsé en sortie, l'autre est pulsé en entrée).

La Fig. 8.11 présente les résultats obtenus en LES avec le maillage 2D, M1. On constate une bonne similitude des résultats obtenus avec les 2 cas tests considérés, contrairement aux résultats obtenus avec le modèle $n - \tau$ standard. De plus, on constate que la contribution de la fluctuation de pression est aussi importante que la contribution de la fluctuation de vitesse. On peut vérifier qu'au début de la zone réactive (vers $x = 5$ cm), le nombre de Helmholtz est déjà grand: $H = 0.45$. Au milieu de la chambre ($x = 15$ cm), $H = 1.12$ et vers le fond de la chambre ($x = 25$ cm), $H = 1.8$. On retrouve un pic autour de la position de stabilisation de la flamme ($x = 10$ cm). Puis vers le fond de la chambre, le reste de réactifs brûle et la flamme répond toujours à l'excitation acoustique.

Cases	Ondes acoustiques aux limites		Etat 1	Etat 2
Case 1	pulsation appliquée		à gauche	à droite
	Coefficient de réflexion	R (entrée)	-	0.1
		R (sortie)	0.13	-
Case 2	pulsation appliquée		à gauche	à droite
	Coefficient de réflexion	R (entrée)	-	0.1
		R (sortie)	0.3	-

TAB. 8.1 – Cas tests utilisés pour l'étude des techniques FTF étendues et ITM appliquées au brûleur ICLEAC.

Nous pouvons maintenant comparer les méthodes FTF et ITM. Pour les techniques ITM, les fluctuations amont de pression et de vitesse sont mesurées au point P_1 (section 6.3.5). Les fluc-

tuations aval sont obtenues en calculant la moyenne spatiale de la pression et de la vitesse dans chaque tranche. Ces moyennes sont stockées à nombre de pas de temps fixé au cours du calcul. Ensuite, on peut déterminer la matrice de passage en fonction de l'abscisse, de la même façon que pour la fonction de transfert.

Un premier calcul 2D a d'abord été réalisé sans combustion. Dans ce cas, seules les techniques ITM sont applicables et les résultats sont validés par comparaison avec la solution analytique (Fig. 8.12). On vérifie ainsi que les résultats obtenus à froid sont cohérents. Les divergences sur la phase de M_{11} et M_{22} n'apparaissent que lors du changement de signe de M_{11} et M_{22} , c'est à dire lorsque leur valeur absolue est proche de zéro. Dans ce cas, la mesure des phases est bruitée.

Une fois que les résultats sans combustion sont validés, les matrices de passage obtenues avec la technique ITM sont calculées dans la configuration 2D avec la flamme. Les résultats sont comparés avec les mêmes matrices obtenues avec les techniques FTF étendues: les coefficients des fonctions de transfert obtenus en LES (Fig. 8.11) sont utilisés pour reconstruire les matrices de transfert en fonction de l'abscisse du brûleur (Tableau 3, dans l'article du chapitre 5). Les résultats sont présentés sur la Fig. 8.13. Ces résultats sont très encourageants: les mêmes ordres de grandeurs et les mêmes tendances sont retrouvées avec les deux méthodes. Néanmoins, des différences sont observées, qui peuvent s'expliquer:

- Les signaux temporels correspondent à 20 cycles acoustiques de temps simulé, ce qui confère environ 18 Hz de précision.
- Les signaux sont très bruités par la turbulence et la flamme, ce qui altère la cohérence des signaux et la précision des mesures.
- La technique ITM est basée sur une approche acoustique 1D, mais les effets 2D de l'écoulement (propagation d'ondes transverses, turbulence) ne sont pas découplés.
- L'influence des parois, des fluctuations de richesse et des extinctions locales sur la réponse de la flamme ne sont pas pris en compte dans les modèles FTF et FTF étendues.

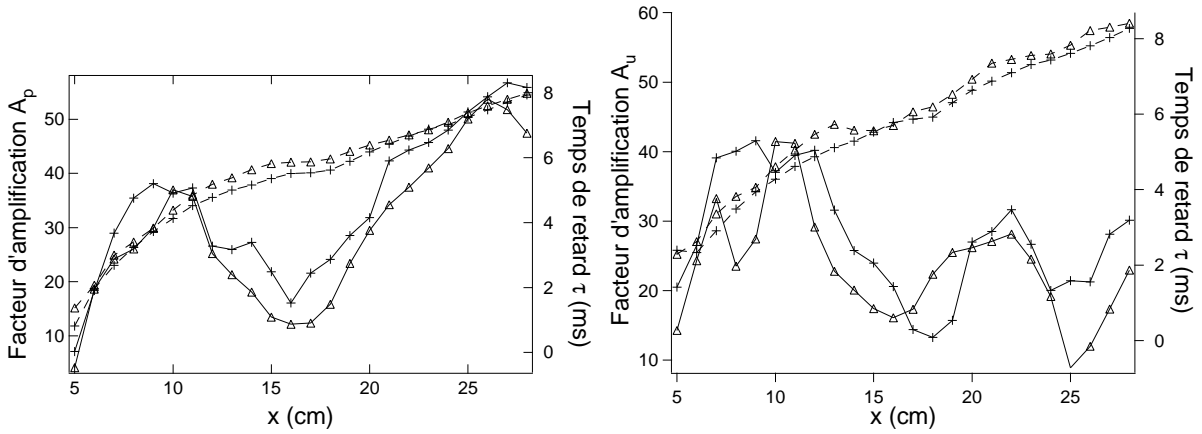


FIG. 8.11 – Fonction de transfert en fonction de l’abscisse du brûleur obtenue avec le modèle $n - \tau$ étendu sur le maillage 2D M1. La fréquence d’excitation est $f = 350$ Hz. Les + correspondent au cas 1 et les Δ correspondent au cas 2; —: facteurs d’amplification (A_p , A_u), ---: temps de retards (τ_p , τ_u).

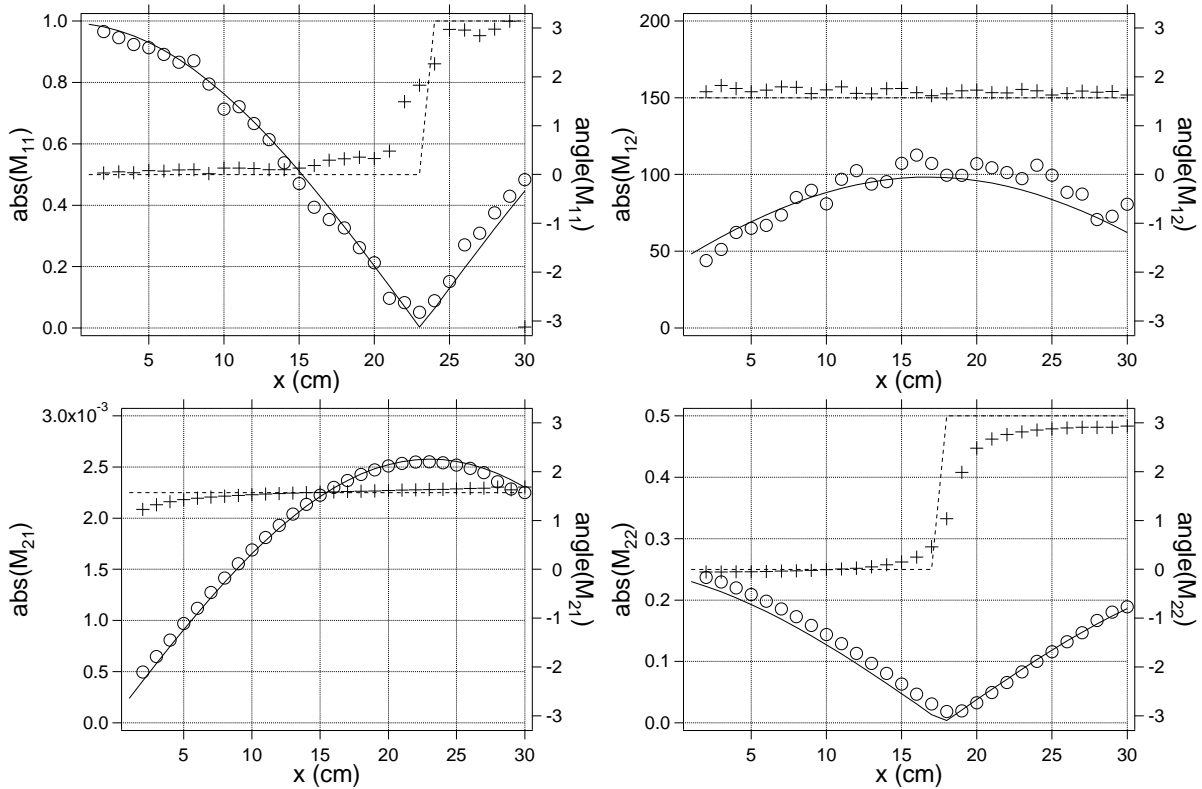


FIG. 8.12 – Coefficients de la matrice de transfert \mathcal{M} dans la configuration 2D (maillage M1) sans combustion. Symboles = LES, lignes = Solution analytique; \circ et —: valeurs absolues, + et ---: phase (rad). La fréquence d’excitation est $f = 350$ Hz.

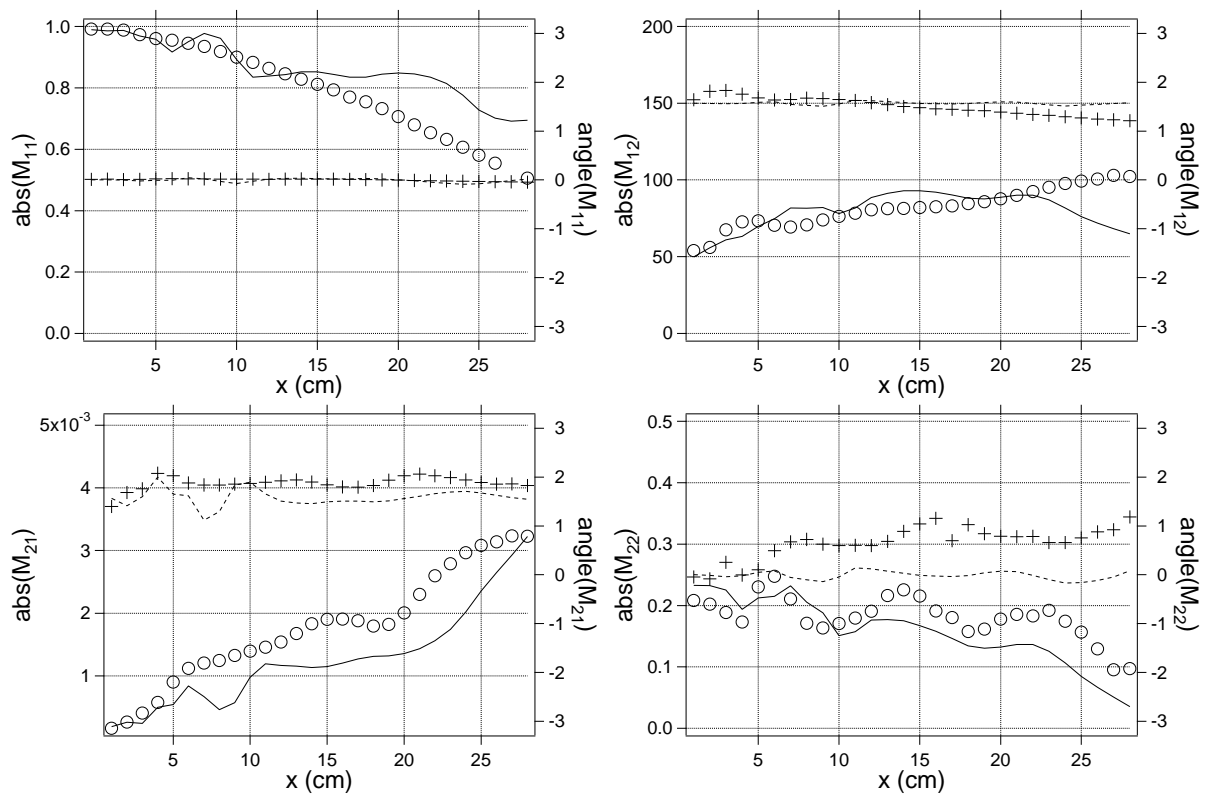


FIG. 8.13 – Coefficients de la matrice de transfert M dans la configuration 2D (maillage M1) avec combustion. Symboles = ITM (LES), lignes = FTF étendues (LES), \circ et $—$: valeurs absolues, $+$ et $- -$: phase (rad).

8.4 Conclusion

Des calculs de flammes turbulentes détachées dans une configuration non prémélangée ont été réalisés en LES pour un cas non forcé et un cas pulsé. La flamme est décrite à l'aide d'un schéma cinétique à deux étapes pour la combustion du propane / air combiné avec le modèle d'épaississement dynamique (DTF). Les résultats LES sont validés à l'aide des mesures PIV et de la PLIF simultanée sur OH et l'acétone, pour comparaison des champs de vitesse, de la fraction massique de propane et du signal de fluorescence de OH . Pour le cas non forcé, les paramètres clés de la combustion partiellement prémélangée comme le mélange des réactifs, la composition des gaz brûlés, la position et la longueur moyenne de la flamme sont bien reproduits. Néanmoins, les comparaisons ne sont pas toujours excellentes. En particulier la position de stabilisation de la flamme et l'analyse de gaz pourraient être améliorés, notamment par:

- l'utilisation d'une loi de paroi, car le maillage LES ne permet pas de résoudre la couche limite,
- l'injection de turbulence en entrée, qui permet d'établir plus rapidement un écoulement turbulent,
- la modélisation de la cinétique à l'aide d'un schéma réduit plus précis que le schéma à 2 étapes.

Le cas forcé est obtenu en pulsant l'écoulement d'air à 350 Hz. Les champs instantanés permettent de détecter les structures cohérentes qui favorisent le mélange et la dynamique de la combustion. Ce couplage entre la dynamique du mélange et la combustion est aussi mis en évidence par les moyennes de phase. La structure de la flamme sous excitation acoustique est correctement reproduite par la LES. Les comparaisons LES/expérience de la fonction de transfert de la flamme à l'aide de la formulation $n - \tau$ ne sont pas concluants, car la flamme est trop longue pour garder un nombre de Helmholtz suffisamment petit (partie II). L'application du modèle $n - \tau$ étendu permet de trouver des résultats indépendants des conditions aux limites, mais aucune comparaison avec l'expérience n'est possible. La matrice de transfert peut-être déterminée à l'aide des paramètres du modèle. La comparaison avec la technique ITM est satisfaisante. Malgré tout, les différences observées dans une configuration assez simple montrent les limites de l'équivalence des deux méthodes.

Lire
la seconde partie
de la thèse