

ÉCOLE DE TECHNOLOGIE SUPÉRIEURE
UNIVERSITÉ DU QUÉBEC

MÉMOIRE DE MAÎTRISE PRÉSENTÉ À
L'ÉCOLE DE TECHNOLOGIE SUPÉRIEURE

COMME EXIGENCE PARTIELLE
À L'OBTENTION DE LA MAÎTRISE
EN GÉNIE MÉCANIQUE
M. Ing.

PAR
Jonathan LEMAY

ÉTUDE NUMÉRIQUE DE CONDITIONS AUX LIMITES
EN SITUATION DE COMBUSTION TURBULENTE NON PRÉMÉLANGÉE

MONTREAL, LE 16 SEPTEMBRE 2010

© Tous droits réservés, Jonathan Lemay, 2010

CE MÉMOIRE A ÉTÉ ÉVALUÉ

PAR UN JURY COMPOSÉ DE :

Professeur Patrice Seers, directeur de mémoire
Département de génie mécanique de l'École de technologie supérieure

Professeur François Morency, président du jury
Département de génie mécanique de l'École de technologie supérieure

Professeur Louis Dufresne, membre du jury
Département de génie mécanique de l'École de technologie supérieure

IL A FAIT L'OBJET D'UNE SOUTENANCE DEVANT JURY ET PUBLIC

LE 12 JUILLET 2010

À L'ÉCOLE DE TECHNOLOGIE SUPÉRIEURE

AVANT-PROPOS

Le phénomène chimique de la combustion est connu et utilisé par l'homme depuis des milliers d'années. Ce n'est cependant qu'à partir du 19^e siècle que l'homme a commencé à produire de l'énergie de manière industrielle à l'aide de la combustion. De nos jours les applications d'ingénierie utilisant des réactions chimiques pour produire de l'énergie sont nombreuses. Même si la mécanique des fluides est une science assez ancienne, la combustion demeure quant à elle une branche plus moderne de la mécanique des fluides réactifs. Au cours des dernières décennies, de grandes percées ont toutefois été accomplies due à la puissance accrue des outils de calculs numériques.

Au cours de ce 21^e siècle la science de la combustion confronte des défis importants. Premièrement avec le prix élevé des carburants, les ingénieurs cherchent maintenant à produire des systèmes toujours plus performants, mais en minimisant la consommation. Dans un deuxième temps, les considérations environnementales actuelles telles que le réchauffement climatique et la pollution atmosphérique ont une influence majeure. En effet, la combustion doit s'effectuer dans des conditions optimales afin de minimiser les impacts causés par celle-ci. Les moteurs aéronautiques sont un bon exemple de ces nouvelles restrictions économiques et environnementales. Les compagnies aériennes désirent maintenant des avions très économiques en carburant et à la fois émettant le moins d'émissions polluantes possibles. Pour toutes ces raisons, il est important d'avoir des outils (de simulation numérique) permettant de prédire les caractéristiques de la combustion dès les premiers moments de la conception. De cette manière, il est possible d'accélérer le processus de conception, en validant les conceptions mécaniques et leurs effets sur le respect des normes environnementales. Les simulations numériques permettent également de diminuer les coûts des études expérimentales, elles-mêmes très onéreuses pour les compagnies.

REMERCIEMENTS

Je désire tout d'abord remercier sincèrement M. Luis Fernando Figueira da Silva de l'Université Pontificale Catholique de Rio de Janeiro. C'est grâce à sa grande générosité et sa patience que ce projet a vu le jour en 2007. Je désire donc lui transmettre mes plus sincères remerciements et lui exprimer toute ma gratitude. L'expérience que j'ai vécu au Brésil avec M. Da Silva fut réellement un évènement marquant dans mon développement professionnel et personnel. Je désire également remercier M. Daniel da Cunha et les gens de la compagnie ESSS du Brésil qui ont accepté de partager leur savoir faire technologique dans l'utilisation du programme ANSYS CFX.

Ici à Montréal, je désire remercier également l'engagement de mon professeur responsable, Patrice Seers, qui a eu le courage et la patience de m'accompagner dès le départ dans mon cheminement académique atypique. J'ai particulièrement apprécié sa grande compréhension ainsi que l'appui qu'il m'a apporté tout au long de ce projet. Son support personnel, professionnel, académique et financier m'a donné les outils pour mener à terme ce projet. Merci Patrice!

Je désire également remercier la contribution de quelques auteurs dont M. Mamdud Hossain de l'Université Robert Gordon, M. Weeratunge Malalasekera and M. Anand Odedra de l'Université de Loughborough et M. Andreas Kempf de l'Imperial Collège de Londres. Grâce à leurs conseils judicieux ou au partage de leurs résultats de recherche, ces auteurs ont grandement contribué à ce mémoire. Merci à vous de la communauté scientifique!

Pour terminer je désire remercier ma famille pour le support moral et l'appui qu'ils m'ont donné tout au long de ce projet. Je dédie aussi ce mémoire à mes grands-parents qui sont pour moi des modèles de persévérance et de fierté. Sans leur présence et leur compréhension je n'aurais pas été en mesure d'accomplir ce projet. Mes derniers mots vont à mon épouse Helinette, qui au travers de toutes les épreuves et évènements importants, autant au Brésil qu'au Canada, a su me reconforter et partager cette période de ma vie.

ÉTUDE NUMÉRIQUE DE CONDITIONS AUX LIMITES EN SITUATION DE COMBUSTION TURBULENTE NON PRÉMÉLANGÉE

Jonathan LEMAY

RÉSUMÉ

Ce mémoire consiste en une étude numérique d'un cas de combustion turbulente non prémélangée. L'objectif principal est d'analyser les prédictions des grandeurs scalaires et vectorielles du champ réactif turbulent en fonction de diverses conditions aux limites fournies par l'écoulement annulaire. Les cas analysés ici, sont comparés avec les données expérimentales de Dally et al. (1998a) de l'Université de Sydney. Pour arriver à cet objectif, le mémoire se divise en trois grandes sections. Dans un premier temps, une étude de maille est effectuée (sur les deux catégories de maillages) afin de montrer l'influence de la discrétisation numérique des deux catégories de modélisation turbulente à effectuer. Dans la seconde partie de ce mémoire l'écoulement inerte turbulent de Dally et al. (1998a) est simulé. Ainsi, quelques modèles de turbulence (implémentés dans ANSYS CFX©) sont analysés, afin de choisir le plus pertinent pour les simulations des écoulements inertes et réactifs. Dans cette deuxième partie, une première étude de variation des conditions aux limites de l'écoulement annulaire est également effectuée. La dernière partie de cet ouvrage se concentre sur la simulation réactive du cas HM1 de Dally et al. (1998a). Dans ce chapitre, la combustion est modélisée en utilisant l'hypothèse de régime de flammelette et la turbulence est simulée en utilisant un modèle dénommée EARSM. L'étude des conditions aux limites annulaires de ces cas réactifs est effectuée en utilisant des profils de vitesse et d'intensité turbulente expérimentaux (pour le modèle sans canal de développement) et un profil uniforme (pour les modèles avec diverses longueurs de canal de développement annulaire). Le but de l'exercice est de déterminer quelles conditions aux limites annulaires (profils expérimentaux vs canaux de développement annulaire) sont les meilleures pour décrire le cas réactif HM1. Dans un premier temps, le champ vectoriel de l'écoulement réactif est analysé afin d'étudier la structure turbulente de l'écoulement. Finalement, les grandeurs scalaires comme la fraction de mélange, la température et les concentrations des espèces chimiques majeures sont analysées en fonction des conditions aux limites annulaires respectives. Les simulations ont démontré que l'utilisation du modèle EARSM en conjonction avec l'ajout des conditions aux limites annulaires expérimentales a permis d'améliorer les prédictions de l'écoulement inerte et ce, particulièrement pour les stations plus éloignées de la face du brûleur. Lors de la simulation de l'écoulement réactif, l'utilisation de ces dernières conditions aux limites expérimentales ont empiré les résultats et ce sont les modèles avec profil uniforme qui ont fourni les meilleurs résultats. Les prédictions des températures sont relativement bonnes pour toutes les stations de mesures alors que les concentrations en espèces chimiques, interpolées à l'aide d'une table de valeurs, ont fourni que des résultats valides pour un domaine restreint à 45 mm de la face du brûleur.

Mots clés: Flammelette, Turbulence, Combustion Non prémélangée, Bluff-Body

BOUNDARIES CONDITIONS NUMERICAL STUDY IN A TURBULENT NON- PREMIXED COMBUSTION SITUATION

Jonathan LEMAY

ABSTRACT

This work is a numerical study on the turbulent non-premixed flame HM1 of Sydney's University. The main objective of this thesis is to analyze the predictions of the vectorial and scalar quantities as a function of various boundary conditions applied to the annular flow field. The cases analyzed here are compared with experimental results Dally et al. (1998a). To fulfill the objectives of this thesis, the present document is divided in three main sections. First, a grid sensitivity analysis is performed on the two main categories of grid (for first and second order turbulence model) in order to show the effect of the physical discretization on each of the turbulent modeling approach. The second part of this work consists on a study of the turbulence models, already implemented on ANSYS CFX, that can be used for simulating both inert and reacting flows. Thus, the inert flow of Dally et al. (1998a) is simulated using first and second order closure models modeling approach in order to choose the best model to be used for the reacting case. Also, a first sensitivity case study of the annular boundaries conditions is performed on the non reacting flow. The main and last topic of this thesis features the simulation of the HM1 turbulent flame of Dally et al. (1998a). For this reacting case, the modeling of combustion and turbulence is respectively done by using the flamelet regime hypothesis and the EARSM model. The first annular boundary condition analysis is performed by using the experimental profile of velocities and turbulent energy. Then, to try enhancing the quality of the vectorial and scalar quantities prediction, the profiles of those quantities are imposed to follow a mean uniform distribution. The main difference of this approach is that those uniform profiles are applied to grids featuring different annular channel development length. The goal of this approach is to demonstrate which annular boundary condition would be the most effective to correctly predicts the HM1 flame quantities. For this study, the vector fields of the reacting case is firstly depicted in order to characterize the turbulent structure of the flow. Then the scalars quantities such as mixture fraction, temperatures and concentration of chemical species are also analyzed as a function of their respective annulus boundaries conditions. The simulation showed that the usage of the EARSM model in addition to the experimental annular boundary conditions helped significantly enhancing the predictions of the non-reacting flow, particularly for the measured stations far away from the bluff-body face. While simulating the reacting flow, using the experimental boundary conditions had the contrary effect and decrease the quality of the predictions and the uniform profiles cases were the ones that give better results. Overall, the predictions of temperatures are generally in good agreement with the experimental results for all measured stations. On the other hand, the chemical species concentrations do not follow the same trend and the validity of the predictions are restricted to a region of 45 mm from the burner's face.

Keywords: Flamelet, Bluff-body, Turbulence, Non-premixed combustion

TABLE DES MATIÈRES

INTRODUCTION.....	1
CHAPITRE 1 REVUE DE LITTÉRATURE	4
1.1 Présentation des données expérimentales.....	4
1.2 Simulations numériques de Dally et al. (1998a).....	7
1.2.1 Détail de modélisation	7
1.2.2 Résultats.....	8
1.2.3 Conclusions.....	10
1.3 Effet de la radiation sur la combustion.....	10
1.3.1 Résultats.....	11
1.3.2 Conclusions.....	11
1.4 Modèles de turbulence de deuxième ordre.....	12
1.4.1 Résultats.....	13
1.4.2 Conclusions.....	15
1.5 Modèle de combustion de flammelettes.....	15
1.5.1 Résultats.....	16
1.5.2 Conclusions.....	17
1.6 Modèles algébrique explicite et approche de flammelettes.....	18
1.6.1 Résultats.....	18
1.6.2 Conclusions.....	19
1.7 Modèles de deuxième ordre et approche de flammelettes	20
1.7.1 Résultats.....	20
1.7.2 Conclusions.....	21
1.8 Bibliothèque de flamme transitoire.....	22
1.8.1 Résultats.....	23
1.8.2 Conclusions.....	24
1.9 Orientation du sujet de recherche	24
CHAPITRE 2 FONDEMENTS THÉORIQUES	27
2.1 Équations de conservation.....	27
2.2 Modélisation de la turbulence.....	28
2.3 Modélisation des termes ouverts.....	30
2.4 Modèles de viscosité cinétique turbulente pour le tenseur de contraintes de Reynolds	31
2.4.1 Modèle k-epsilon.....	32
2.4.2 Modèle k- ω	33
2.4.3 Modèle SST.....	34
2.5 Modèle de transport du tenseur de contraintes de Reynolds (DRSM).....	34
2.5.1 Modèle LRR.....	37
2.5.2 Modèle SSG	37
2.6 Modèles algébriques du tenseur de contraintes de Reynolds.....	38
2.6.1 Modèle ARSM	39
2.6.2 Modèle EARSMS.....	40

2.7	Combustion turbulente non prémélangée.....	41
2.7.1	Modélisation RANS de la combustion turbulente non prémélangée	42
2.7.2	Stœchiométrie.....	43
2.7.3	Scalaire passif et l'élément de flammelette.....	44
2.7.4	Calcul du terme source	46
2.7.5	Construction de la bibliothèque de flamme	48
2.7.6	Résolution RANS de l'écoulement turbulent réactif dans CFX	49
CHAPITRE 3 MAILLAGE ET CONDITIONS AUX LIMITES		51
3.1	Maillage des modèles de deux équations	51
3.2	Maillage des modèles DRSM	53
3.3	Conditions aux limites.....	53
3.4	Étude de Maillage	54
3.4.1	Présentation des maillages de l'étude de maillage	55
3.4.2	Analyse de maille	57
3.4.3	Caractérisation de l'erreur avec la technique GCI	61
3.4.4	Utilisation de la méthode GCI avec les modèles en cours.....	63
CHAPITRE 4 PRÉSENTATION DES RÉSULTATS INERTES.....		64
4.1	Modèles de deux équations.....	64
4.2	Modèle DRSM.....	70
4.3	Comparaison entre modèles DRSM et 2-équations	74
4.4	Comparaison des conditions aux limites.....	80
4.5	Conclusions.....	85
CHAPITRE 5 PRÉSENTATION DES RÉSULTATS RÉACTIFS		88
5.1	Bibliothèque de flamme	88
5.2	Champs de vectoriel.....	89
5.3	Grandeurs scalaires calculées par CFX.....	98
5.4	Grandeurs scalaires calculées par la bibliothèque de flamme.	103
5.5	Conclusion écoulement réactif.....	109
CONCLUSIONS.....		113
RECOMMANDATIONS		116
BIBLIOGRAPHIE		118

LISTE DES TABLEAUX

	Page
Tableau 1.1	Sommaire des cas expérimentaux de Dally et al. (1998b)16
Tableau 2.1	Sommaire des constantes pour les modèles LRR-IP et SSG.....38
Tableau 3.1	Conditions aux limites53
Tableau 3.2	Discretisation numérique du montage de Dally et al. (1998a) selon quelques auteurs de la littérature.....56
Tableau 3.3	Discretisation numérique des modèles à deux équations56
Tableau 3.4	Discretisation numérique des modèles de deuxième ordre.....56
Tableau 4.1	Sommaire des simulations effectuées pour les cas non réactifs avec canal de développement annulaire87
Tableau 4.2	Sommaire des simulations effectuées pour les cas non réactifs sans canal de développement annulaire avec CFE et CFU87
Tableau 5.1	Sommaire des simulations effectuées pour les cas réactifs HM1 de Dally et al. (1998a)112

LISTE DES FIGURES

		Page
Figure 1.1	Brûleur de type «corps central libre» (Adapté de Dally et al. 1998, p.195).....	5
Figure 1.2	Structure turbulente de l'écoulement inerte. (Adapté de Dally et al. 1998, p. 203).....	6
Figure 1.3	Comparaison des profils de températures expérimentales et numériques de Hossain des flammes HM1 et HM3. (Tiré de Hossain, 2005, p. 367).....	17
Figure 2.1	Vitesse instantanée et valeur moyenne dans le temps. (Adapté de Nieckle 2006, p. 16).....	29
Figure 2.2	Changement de variable pour un élément de flamme de diffusion. Adaptée de Poinsot (2005, p. 87).....	45
Figure 2.3	Concept d'élément de flammelette emboutie dans un champ turbulent. Adaptée de Poinsot (2005, p. 323).....	46
Figure 2.4	Méthode de résolution d'un écoulement réactif à l'aide du modèle de combustion flammelette employé dans CFX. Adaptée de Poinsot (2005, p. 323).....	50
Figure 3.1	Maillage et conditions aux limites pour des modèles de 2-Éq. et DRSM.	52
Figure 3.2	Comparaison entre les valeurs expérimentales et numériques de U et u' pour l'étude de maillage des modèles de 2 équations.	59
Figure 3.3	Comparaison entre les valeurs expérimentales et numériques de U et u' pour l'étude de maillage des modèles DRSM.....	60
Figure 4.1	Comparaison entre les valeurs calculées et mesurées de U et u' pour l'étude des modèles de 2-équations.....	67
Figure 4.2	Comparaison entre les valeurs calculées et mesurées de V et v' pour l'étude des modèles de 2-équations.....	68
Figure 4.3	Comparaison entre les valeurs calculées et mesurées de U et u' pour l'étude des modèles de DRSM.....	72
Figure 4.4	Comparaison entre les valeurs calculées et mesurées de V et v' pour l'étude des modèles de DRSM.....	73

Figure 4.5	Comparaison entre les valeurs calculées et mesurées des différents modèles de turbulence pour la prédiction de la vitesse moyenne le long de l'axe central.....	75
Figure 4.6	Comparaison entre les valeurs calculées et mesurées de U et u' pour l'étude comparative des modèles DRSM et 2-équations.....	77
Figure 4.7	Comparaison entre les valeurs calculées et mesurées de V et v' pour l'étude comparative des modèles DRSM et 2-équations.....	78
Figure 4.8	Comparaison entre les résultats expérimentaux de Dally et les lignes de courant numériques pour les vitesses de l'écoulement à froid.	79
Figure 4.9	Zones de recirculation des modèles à CFU (haut) et CFE (bas) pour l'étude des conditions aux limites annulaires de l'écoulement inerte.....	81
Figure 4.10	Comparaison entre les valeurs expérimentales et numériques de U et u' pour l'étude comparative des conditions aux frontières de l'écoulement à froid.	82
Figure 4.11	Comparaison entre les valeurs expérimentales et numériques de V et v' pour l'étude comparative des conditions aux frontières de l'écoulement à froid.	83
Figure 4.12	Comparaison entre les valeurs expérimentales et numériques de U et u' dans le jet à $x = 0$ mm pour l'écoulement inerte.....	84
Figure 4.13	Comparaison entre les valeurs expérimentales et numériques de U et u' dans le jet à $x = 0$ mm pour l'écoulement inerte.....	85
Figure 5.1	Comparaison entre les valeurs expérimentales et numériques de U et u' , en fonction de différentes longueurs de canaux annulaires, pour l'étude du champ vectoriel de l'écoulement réactif HM1.....	91
Figure 5.2	Comparaison entre les valeurs expérimentales et numériques de V et v' , en fonction de différentes longueurs de canaux annulaires, pour l'étude du champ vectoriel de l'écoulement réactif HM1.....	92
Figure 5.3	Comparaison entre les valeurs expérimentales et numériques de U et u' dans le jet à $x = 0$ mm pour l'écoulement réactif.....	93
Figure 5.4	Comparaison entre les valeurs expérimentales et numériques de U et u' de l'écoulement annulaire à $x = 0$ mm pour l'écoulement réactif.....	94
Figure 5.5	Comparaison des lignes de courant de pour différentes longueurs de canaux annulaires avec les résultats numériques de Odedra et Malalasekera (2007) pour l'écoulement réactif HM1.....	95

Figure 5.6	Comparaison entre les vecteurs de vitesse expérimentaux et numériques en fonction des différentes longueurs de canaux annulaires.	97
Figure 5.7	Comparaison entre les valeurs expérimentales et numériques de Z et z' , en fonction de différentes longueurs de canaux annulaires, pour l'étude du champ scalaire de l'écoulement réactif HM1.	99
Figure 5.8	Comparaison numérique de $\tilde{\chi}$, en fonction de différentes longueurs de canaux annulaires et hauteurs axiales.	101
Figure 5.9	Comparaison entre les valeurs expérimentales et numériques de température, en fonction de différentes longueurs de canaux annulaires, pour l'étude du champ scalaire de l'écoulement réactif HM1.	102
Figure 5.10	Comparaison entre les valeurs expérimentales et numériques des concentrations de H_2O , en fonction de différentes longueurs de canaux annulaires, pour l'étude du champ scalaire de l'écoulement réactif HM1. ...	104
Figure 5.11	Comparaison entre les valeurs expérimentales et numériques des concentrations de OH , en fonction de différentes longueurs de canaux annulaires, pour l'étude du champ scalaire de l'écoulement réactif HM1. .	105
Figure 5.12	Comparaison entre les valeurs expérimentales et numériques des concentrations de CH_4 , en fonction de différentes longueurs de canaux annulaires, pour l'étude du champ scalaire de l'écoulement réactif HM1. ...	106
Figure 5.13	Comparaison entre les valeurs expérimentales et numériques des concentrations de CO_2 , en fonction de différentes longueurs de canaux annulaires, pour l'étude du champ scalaire de l'écoulement réactif HM1. ...	108
Figure 5.14	Comparaison entre les valeurs expérimentales et numériques des concentrations de CO , en fonction de différentes longueurs de canaux annulaires, pour l'étude du champ scalaire de l'écoulement réactif HM1. .	109

LISTE DES ABRÉVIATIONS, SIGLES ET ACRONYMES

Lettre latine minuscule:

a_{ij} = tenseur de contraintes anisotropiques

erf = fonction d'erreur générée lors de l'intégration de la distribution normale

g = constante gravitationnelle

h_i = enthalpie spécifique de l'espèce i

i,j,k = composantes de l'écoulement dans les directions x , y et z

\dot{m}_i = taux de production de l'espèce chimique i

n_x = nombre de nœuds axial

n_ϕ = nombre de nœuds circonférentiel

n_r = nombre de nœuds radial

n_{r_jet} = nombre de nœuds radial dans le jet

n_{r_b} = nombre de nœuds radial à la face du brûleur

n = nombre de nœuds total dans le maillage

n_t = nombre de pas de temps calculé

p = pression

\dot{q}_r = perte de chaleur par radiation

r = rayon

u = vitesse de l'écoulement

u' = variation de U

v' = variation de V

x = direction axiale de l'écoulement

y = distance du mur le plus rapproché

\widetilde{z}^2 = variance de la fraction de mélange (variation du scalaire passif Z)

Lettre latine majuscule:

$C_{\epsilon 1}$ = constante C_1 de production d'énergie cinétique du modèle k-epsilon

$C_{\epsilon 2}$ = constante C_2 de dissipation d'énergie cinétique du modèle k-epsilon

C_{μ} = constante de proportionnalité empirique du modèle k-epsilon

C_p = coefficient de transfert de chaleur

$C_{ij}^{(a)}$ = tenseur coriolis.

CFU = Condition Frontière Uniforme

CFE = Condition Frontière Expérimentale

CNP = combustion non prémélangée

CH₄ = molécule de Méthane

CO₂ = molécule de dioxyde de carbone

CO = molécule de monoxyde de carbone

D_B = diamètre du corps central du brûleur

DRSM = modèle différentiel du tenseur des contraintes de Reynolds

D_H = diamètre hydraulique

D_k = coefficient de diffusion de l'espèce K déterminé selon la loi de Fick

EARSM = modèle explicite et algébrique du tenseur de contraintes de Reynolds

H₂O = molécule d'eau

K = énergie cinétique

L_D = longueur théorique de développement

Le_i = nombre de Lewis de l'espèce

LES = simulation aux grandes échelles

N = nombre d'espèces chimiques

PDF = fonction de densité de probabilité

PIV = vélocimétrie par images de particules

OH = molécule d'hydroxyde

P_{κ} = production d'énergie cinétique turbulente

RANS = équations de Navier-Stokes moyennés

Re_T = nombre de Reynolds turbulent
 R_B = rayon du corps central du brûleur
 S = taux de déformation local
 S_{ij} = tenseurs de déformation non-dimensionnel
 Sc_{kt} = nombre de Schmidt turbulent de l'espèce K
 T = flux turbulent du tenseur de contraintes de Reynolds
 T_F^0 = température initiale du combustible
 T_O^0 = température initiale de l'oxydant
 $T_I^{(k)}$ = flux moléculaire de l'énergie cinétique turbulente
 U = composante axiale de vitesse de l'écoulement
 V = composante radiale de vitesse de l'écoulement
 V_j = vitesse du jet central
 V_{co} = vitesse de l'écoulement annulaire
 $V_{k,i} Y_k$ = flux laminaire diffusif de l'espèce Y_k
 $V_{k,i} Y_k h_{s,k}$ = flux laminaire diffusif d'enthalpie totale de l'espèce Y_k
 W_k = poids moléculaire de l'espèce k
 Y_F^0 = fraction massique initiale du combustible
 Y_k = fraction massique de l'espèce k
 Y_O^0 = fraction massique initiale de l'oxydant
 \tilde{Z} = fraction de mélange
 Z_{st} = fraction de mélange stochiométrique

Lettre grecque :

Ω_{ij} = taux de rotation non-dimensionnel
 β = fonction PDF Bêta
 δ_{ij} = delta de Kronecker
 ε = taux de dissipation d'énergie cinétique turbulente
 $\phi_{ij,1}$ = terme de retour à l'isentropie du taux de dissipation d'énergie turbulente

$\phi_{ij,2}$ = terme isentropique de production d'énergie cinétique turbulente

k = énergie cinétique turbulente

λ = coefficient de diffusivité thermique

μ = viscosité dynamique

μ_t = viscosité turbulente

v_k' = coefficients stœchiométriques des réactants de l'équation chimique balancée

v_k'' = coefficients stœchiométriques des produits de l'équation chimique balancée

ρ = masse volumique

σ_k = constante empirique représentant le nombre de Prandtl gouvernant la diffusion turbulente de k

σ_ϵ = constantes empiriques représentant le nombre de Prandtl gouvernant la diffusion turbulente de ϵ

σ_ω = constantes empiriques représentant le nombre de Prandtl gouvernant la diffusion turbulente de ω

τ_t = échelle de temps caractéristique de la turbulence

τ_c = échelle de temps caractéristique de la combustion

ω = vorticité

$\dot{\omega}_k$ = taux de production de l'espèce k

$\dot{\omega}_T$ = terme source de chaleur du à la combustion

$\tilde{\chi} = \frac{\partial \tilde{z}^2}{\partial t}$ = taux de dissipation du scalaire passif Z

$\tilde{\chi}_{st}$ = taux de dissipation scalaire passif Z à la stœchiométrie

INTRODUCTION

La combustion est une branche de la mécanique des fluides réactive, relativement récente. Les logiciels commerciaux génériques de mécanique des fluides incluent maintenant des modèles de combustion, mais relativement peu d'ouvrage de la littérature se concentrent sur la validation de tels outils d'ingénierie. Dans un contexte d'application industrielle où ces outils numériques sont de plus en plus utilisés, il est important de valider et identifier les limites de tels outils. Le cas spécifique de la combustion turbulente non prémélangée est un belle exemple d'application largement utilisée en industrie. Dans le domaine de l'énergie par exemple, ce type de combustion est vastement employée, car il est souvent plus facile de contrôler la combustion lorsque l'oxydant est injecté séparément du carburant. Dans ce type d'applications d'ingénierie, le niveau de complexité du système est souvent augmenté, car la turbulence est utilisée en conjonction avec la combustion afin de mieux mélanger l'oxydant et le carburant.

Le présent mémoire a pour but de valider certains modèles de turbulence et de combustion dans le contexte d'un processus de combustion turbulente non prémélangée et de valider l'effet des conditions aux limites annulaires sur les prédictions. Comme la turbulence affecte particulièrement le mélange d'oxydant et de carburant, l'influence de ce paramètre sur les variables de combustion sera analysé de manière détaillée dans ce rapport. L'utilisation d'un code numérique commercial (CFX©) permettra également de tester plusieurs modèles de turbulence, tout en identifiant les limitations de chacun d'entre eux. Les résultats numériques seront par la suite comparés avec les résultats expérimentaux de Dally et al. (1998a) de l'université de Sydney.

En ce qui a trait à la méthodologie, le présent mémoire sera divisé de la manière suivante. Premièrement, une revue de littérature sera effectuée afin de voir quelles approches ont été utilisées dans le passé afin de simuler cette flamme turbulente. Cet exercice permettra également de baser les hypothèses et conditions de simulation en fonction des résultats déjà connus de la littérature.

Le deuxième chapitre de ce mémoire est constitué d'une révision bibliographique dans laquelle les concepts physiques fondamentaux ainsi que les équations constitutives de la mécanique des fluides et de la combustion sont présentées. Ce chapitre présentera également la procédure utilisée par le code numérique afin de résoudre l'écoulement réactif.

Le troisième chapitre présentera la discrétisation numérique et les conditions aux limites utilisées afin de résoudre l'écoulement. Dû aux restrictions du code numérique face à l'utilisation des modèles de turbulence, deux catégories de maillages seront présentées. Pour chacune des catégories, une étude de maille de l'écoulement à froid sera effectuée afin de voir l'influence du maillage sur la solution numérique. Pour compléter cette caractérisation des maillages, une méthode numérique permettant d'établir le niveau de confiance relatif de la grille choisie sera présentée.

Le quatrième chapitre de ce mémoire présente les résultats numériques de l'écoulement à froid de Dally et al. (1998a). Même si l'objectif principal de ce mémoire est de simuler l'écoulement réactif, la validation de l'écoulement à froid est importante. En effet, en comparant les composantes de vitesses et leurs variations respectives, il sera possible de comparer les modèles de turbulence entre eux et de choisir le plus adapté pour l'écoulement réactif. Une première étude inerte sera également effectuée afin de voir l'effet des conditions aux limites annulaires sur la qualité des prédictions du champ de vitesse.

Le dernier chapitre de ce mémoire se concentrera sur les résultats réactifs de la flamme HM1 de Dally et al. (1998a). En plus de la validation du champ de vitesse, les prédictions de la fraction de mélange seront présentées en second lieu. Avec le modèle de combustion utilisée, la qualité des prédictions en espèces chimiques dépendra directement de la prédiction de cette dernière variable. Les prédictions de température et d'espèces chimiques seront commentées en tentant d'établir des liens entre les variables scalaires et vectorielles. Ce type d'analyse permet alors de valider la présence et la cohérence de certaines espèces chimiques générées lors de la combustion. De plus, une étude plus exhaustive des conditions aux limites annulaires, impliquant l'utilisation de nouvelles discrétisations du domaine de calcul

permettra de voir l'influence de la longueur de développement du canal d'entrée annulaire sur les prédictions des grandeurs scalaires et vectorielles du cas réactif.

Finalement, des conclusions générales quant à l'utilisation des modèles de turbulence et de combustion utilisée dans ce mémoire seront apportées. Les limitations et problèmes rencontrés avec le code numérique seront également exposées afin de conclure sur l'utilisation d'un tel outil pour simuler ce type d'écoulement spécifique.

CHAPITRE 1

REVUE DE LITTÉRATURE

Le brûleur à corps central libre (bluff-body) est un outil qui a été vastement utilisé dans la littérature expérimentale (Schefer et al. (1987) Dally et al. (1998a)) pour étudier la combustion turbulente non prémélangée. Dû à sa configuration géométrique simple, ce brûleur à l'avantage d'être plus facilement simulable numériquement et diminue la charge de calcul qu'imposerait une géométrie plus complexe. Ce premier chapitre a pour objectif de présenter les données expérimentales utilisées au cours de ce projet, ainsi que de réviser certains travaux de la littérature traitant des études numériques effectuées sur la flamme HM1 de Dally et al. (1998a).

1.1 Présentation des données expérimentales

Dally et al. (1998a) de l'université de Sydney ont publié publiant des données expérimentales accompagnées de simulations numériques pour plusieurs cas de combustion turbulente non prémélangée. La Figure 1.1 décrit le brûleur tel que proposé dans l'article de ces auteurs ainsi que la nomenclature se rattachant aux diverses régions. L'écoulement annulaire est fourni à l'aide d'une soufflerie rectangulaire de 230 mm x 230 mm de section transversale. La partie centrale est quant à elle constituée d'un cylindre plein de 50 mm de diamètre percée d'un canal coaxial de 3.6 mm fournissant le combustible. Une couche de céramique servant de bouclier thermique a été déposée sur la face supérieure du brûleur.

Les données expérimentales de Dally et al. (1998a) sont utilisées par tous les auteurs consultés dans cette revue de littérature. Les deux cas expérimentaux utilisés pour fin de comparaison sont respectivement l'écoulement inerte air-air et l'écoulement réactif. Pour ce premier cas non-réactif, les vitesses moyennes de l'écoulement annulaire (V_{co}) et du jet central (V_j) ont été fixées respectivement à 20 et 60 m/s. Ce type d'écoulement est caractérisé par un jet dominant central qui pénètre dans une zone de recirculation et qui continue de se propager plus loin en amont. Pour le cas réactif, la flamme étudiée ici est dénommée HM1 et

est caractérisée par une $V_{co} = 40 \text{ m/s}$ et $V_j = 118 \text{ m/s}$. Les auteurs ont utilisé un mélange de combustible à partie égale volumique de méthane et d'hydrogène (50:50 CH_4/H_2), afin de diminuer la quantité de suie de l'écoulement et ainsi pouvoir utiliser la technique de diffusion Rayleigh (Murphy et Farmer (1992)) pour mesurer la température et la fraction massique de combustible.

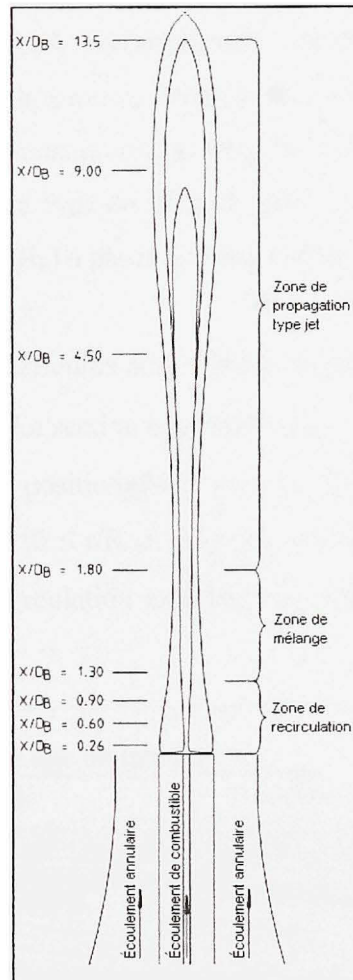


Figure 1.1 Brûleur de type «corps central libre» (Adapté de Dally et al. 1998, p.195)

Une des caractéristiques importantes de la flamme non prémélangée est sa vitesse d'extinction. Elle est obtenue lorsque, pour un débit de carburant donné, l'extinction survient suite à un débit d'oxydant trop élevé. Le pourcentage de vitesse d'extinction est alors calculé en divisant V_j par V_{co} . Bien qu'ils ne s'en soient pas servi pour leur article, Dally et al.

(1998a) ont expérimenté un second cas réactif appelée HM1E suite à l'impossibilité d'obtenir une vitesse d'écoulement annulaire homogène. En effet, comme la soufflerie ne réussissait pas à fournir une puissance suffisante pour assurer la constance du champ de vitesse, celle-ci a été réduite de 118 m/s à 108 m/s. Conséquemment, afin de conserver un pourcentage de vitesse d'extinction similaire à la flamme HM1, la vitesse du jet a été baissée de 40 m/s à 35 m/s. Tel qu'illustré par les vecteurs de vitesse et les lignes de courant expérimentales (calculée à l'aide de données expérimentales obtenues par vélocimétrie par image de particules) de la Figure 1.2, la zone de mélange principale est caractérisée par la présence de deux zones de recirculation majeures. L'axe des abscisses représente la distance axiale normalisée (X) à partir de la face du brûleur, tandis que l'axe des ordonnées représente la distance radiale normalisée (R_b) à partir de l'axe central du brûleur.

Ces zones intérieures et extérieures sont situées radialement entre $0 \leq r/R_b \leq 0.4$ et $0.4 \leq r/R_b \leq 1.0$ respectivement. La section extérieure ($0.4 \leq r/R_b \leq 0.95$) de l'écoulement possède deux zones de recirculation positionnées à environ $X/D_B \approx 0.35$ et $X/D_B \approx 0.65$ axialement alors que la zone intérieure ($0 \leq r/R_b \leq 0.4$) n'en possède qu'une localisée à $X/D_B \approx 0.50$. Les longueurs des zones de recirculation extérieure et intérieure sont respectivement d'environ 0.96 et $0.90 X/D_B$.

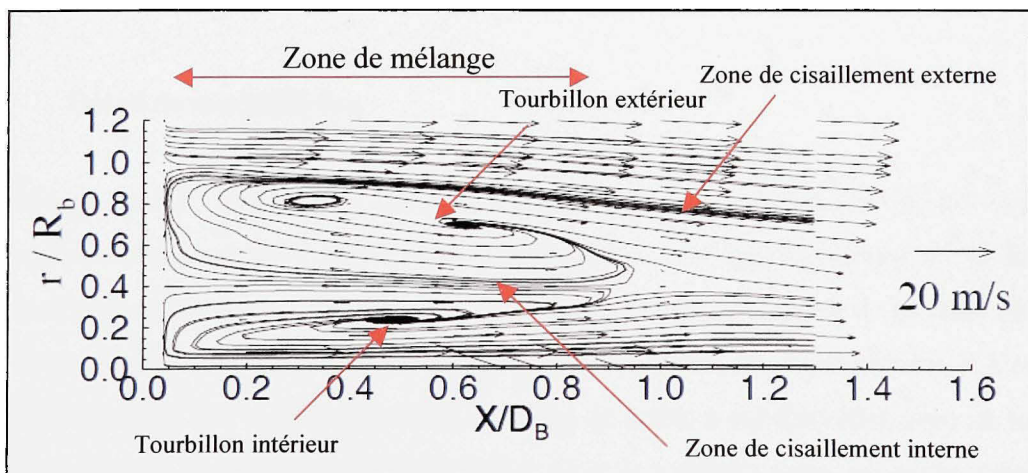


Figure 1.2 Structure turbulente de l'écoulement inerte.
(Adapté de Dally et al. 1998, p. 203)

1.2 Simulations numériques de Dally et al. (1998a)

Les travaux de Dally et al. (1998b) ont été très prolifiques, car en plus de publier une grande quantité de données expérimentales, une comparaison a été faite avec différents modèles de turbulence et un modèle de combustion de base Dally et al. (1998a). La modélisation de la turbulence est basée sur les équations de Naviers-Stokes moyennées (RANS) et utilise des modèles de premier (k-epsilon) et de second ordre (LRR), Launder et al. (1975). Dans le cas du modèle k-epsilon classique, l'auteur propose une version modifiée en changeant la constante $C_{\epsilon 1}$ à 1.6 au lieu de sa valeur typique de 1.44. Afin de valider cette modification, les auteurs ont repris les données expérimentales de Schefer et al. (1987) et ont simulé l'écoulement réactif à l'aide du logiciel commercial CFX 4. Cette modification à la constante a eu pour effet d'améliorer la prédiction de la vitesse le long de l'axe central dans la zone de recirculation de la Figure 1.1.

Pour représenter la cinétique chimique du cas de Schefer et al. (1987) tout comme celle de leurs propres expériences, le concept de chimie infiniment rapide (où l'échelle de temps de la combustion est très inférieure à l'échelle de temps de la turbulence) a été utilisé. En utilisant ce modèle, le taux de réaction devient donc proportionnel au modèle de turbulence utilisé ($\tau_c \approx \tau_t$).

1.2.1 Détail de modélisation

Le maillage utilisé dans cette simulation numérique est cylindrique et est composé d'éléments orthogonaux 3D. Axialement, il commence 100 mm en amont de la face du brûleur, afin d'assurer un profil de vitesse totalement développé à partir de sa face. En aval, le domaine s'étire jusqu'à 300 mm de ce même point de référence. Radialement, il s'étend à 70 mm à partir de l'axe central du jet. Ce domaine de calcul a été discrétisé avec un total de 100 nœuds dans la direction axiale et 60 dans la direction radiale, avec une concentration de points dans la région du corps central du brûleur. Pour les conditions aux limites, Dally et al. (1998a) ne spécifient pas de conditions d'entrée, mais ont appliqué une condition frontière de

pression constante sur les parois latérales ainsi qu'à la sortie du domaine. En ce qui concerne l'échange de chaleur avec la face du brûleur, elle a été résolue numériquement et celle-ci a été traitée comme un corps solide possédant une conductivité thermique équivalente à celle de la céramique utilisée dans le montage expérimental.

1.2.2 Résultats

Les résultats de Dally et al. (1998a) ont montré qu'une simple modification à la constante $C_{\epsilon 1}$ dans l'équation de dissipation (traditionnellement de 1.44 et modifié à 1.6) améliorait de manière significative, autant pour l'écoulement à froid que réactif, les prédictions de ce cas particulier de brûleur. Ils ont également conclu que le modèle de turbulence de second ordre de tenseur de contraintes de Reynolds apportait une légère amélioration aux prédictions. Par contre, dû aux exigences de temps de calcul plus élevée qu'exigeait ce modèle à l'époque, et en tenant compte de l'aspect d'application industrielle que privilégiait l'article, le modèle LRR ne constituait pas une alternative viable selon les auteurs.

Il est toutefois important de mentionner que les méthodes numériques utilisées pour résoudre les deux types de modèles n'ont pas été les mêmes. En effet, dû aux ressources de calcul de l'époque, la discrétisation numérique de haute résolution n'a été appliquée qu'au modèle k-epsilon, étant donné sa plus grande robustesse.

En ce qui concerne les résultats numériques de l'écoulement à froid, Dally et al. (1998a) concluent que le modèle classique k-epsilon est «surdiffusif», car il surestime le taux de décroissance de la vitesse le long de l'axe central du brûleur. De plus, la longueur du tourbillon central extérieur est sous-estimée de 20%. La modification de la constante $C_{\epsilon 1}$ a permis d'améliorer les caractéristiques principales de l'écoulement dans la zone de recirculation (vitesse et variation de vitesse, etc.) et de prédire correctement la longueur du tourbillon central. Pour les prévisions de la zone de mélange intense ($X/D_B = 1.3$), les prédictions du modèle LRR sont meilleures que celles de k-epsilon et k-epsilon modifié. En ce qui concerne les fluctuations des vitesses axiales (u') et radiales (v'), elles sont

généralement surestimées au voisinage de la surface du brûleur alors qu'elles s'améliorent en amont. Deux sommets de fluctuation de vitesse sont présents pour u' et v' dans la zone de recirculation, représentant les zones de cisaillement du jet central et de l'écoulement annulaire avec l'air ambiant. Ces maximums de vitesses sont, quant à eux, mieux représentés par le modèle de base qu'avec le modèle modifié.

Pour la simulation de l'écoulement réactif, les modèles modifiés fournissent de bonnes prédictions du champ de vitesse axiale et radiale jusqu'à $X/D_B = 1.8$. Avec le modèle LRR de base, la longueur du tourbillon central est prédite à $1.3 D_B$ alors que la longueur mesurée en laboratoire est de $1.6 D_B$. Le taux de décroissance de la vitesse le long de l'axe central est quant à lui sous-estimé de 23%. Pour les deux modèles de turbulence non modifiés, le modèle LRR donne de meilleurs résultats jusqu'à une distance de $X/D_B = 0.6$ alors que le modèle k-epsilon n'est bon que jusqu'à une distance axiale de $X/D_B = 0.1$. En ce qui concerne les variations de vitesses, le modèle de base LRR et sa version modifiée apportent de bonnes prédictions (similaires entre elles) pour toutes les stations de mesures, mais elles se détériorent près de l'axe central du brûleur. Pour les prédictions de la fraction de mélange (Z) et de sa fluctuation respective (z'), les modèles de turbulence modifiés utilisés en conjonction avec l'hypothèse de combustion infiniment rapide apportent une bonne concordance si l'on considère la complexité de l'écoulement et la simplicité du modèle de cinétique chimique. Les modèles standard sous-estiment la fraction de mélange entre 30 et 50% dépendamment de la localisation axiale. La fluctuation de Z est le mieux représentée avec le modèle LRR modifié jusqu'à une distance axiale de $X/D_B = 0.9$. Les températures sont également mieux prédites avec les modèles modifiés et tout particulièrement avec le modèle LRR pour une zone restreinte à $X/D_B \leq 0.9$. Les modèles standard surestiment la température maximale de la zone de recirculation. Cette surestimation varie entre 200K-500K dans les tourbillons internes et externes.

1.2.3 Conclusions

Finalement, Dally et al. (1998a) concluent que les constantes de base des modèles de turbulence classiques ne réussissent pas à bien prédire la longueur des zones de recirculation de ce brûleur. Tel que validé ultérieurement par d'autres auteurs comme Hossain et Malalasekera (2005), une simple modification à la constante $C_{\epsilon 1}$ de dissipation leur a permis d'améliorer les caractéristiques principales de l'écoulement dans la zone de recirculation (vitesse, variation de vitesse, fraction massique, etc.) pour ce cas particulier de configuration géométrique.

Les auteurs concluent également que le modèle de combustion basé sur l'échelle de temps caractéristique de la turbulence τ_t fournit des prédictions raisonnablement bonnes (de la fraction de mélange, sa variation respective, ainsi que des températures) dans la zone recirculation. En dehors de cette zone restreinte du brûleur, les performances de prédiction de toutes les caractéristiques de l'écoulement diminuent significativement. Toujours selon les auteurs, ces défaillances peuvent être expliquées par une possible anisotropie de la turbulence (limitation du modèle de turbulence) jumelée à la coexistence de différents types de flammes selon les zones du domaine (modèle de combustion choisi).

1.3 Effet de la radiation sur la combustion.

L'échange de chaleur par radiation de la combustion non prémélangée a été négligé par plusieurs auteurs. Marracino et Lentini (1997) ont rapporté que seulement 3% des articles soumis lors du 26^e symposium international de combustion considèrent le transfert de chaleur par radiation. Hossain et al. (2001) ont publié un article présentant l'effet de ce type de transfert de chaleur lors de la simulation numérique de la flamme HM1E de Dally et al. (1998a). Pour ce faire, le modèle de combustion flammelette a été utilisé et un nouveau type bibliothèque de flamme implanté originalement par Marracino et Lentini (1997) a été appliqué. Lors de la génération de la bibliothèque de flamme, le terme source d'enthalpie dans l'équation d'éléments de flamme a été modifié pour tenir compte de la radiation. Pour

modéliser la turbulence Hossain et al. (2001) ont opté pour le modèle classique k-epsilon en y apportant la modification appliquée par Dally et al. (1998a). concernant la constante $C_{\epsilon 1}$. Un profil de vitesse complètement développé a été appliqué pour le jet central ainsi que pour l'écoulement annulaire.

1.3.1 Résultats

Similairement à Dally et al. (1998a) Z et z' sont bien prédits avec le modèle k-epsilon classique avec loi de paroi, pour $X/D_B \leq 1.3$. En ce qui concerne la prédiction des températures, les résultats montrent que l'échange de chaleur par radiation a un effet négligeable sur ce dernier paramètre. L'unique différence du modèle prenant en compte de la radiation se situe au voisinage de la face du brûleur, où la température est augmentée d'environ 40 degrés. L'auteur explique cette mince différence de température par le transfert de chaleur par radiation entre la flamme et la céramique de la face du brûleur.

Le principal effet apporté par l'ajout du transfert de chaleur par radiation se situe au niveau de la prédiction des espèces à faible masse molaire tel le OH. En effet, une amélioration générale des prédictions peut être observé dans la majorité des stations mesurées et encore plus particulièrement aux stations $X/D_B = 0.6$ et 0.9 . Pour les autres espèces majeures, (H_2O , CO et CO_2) la radiation n'affecte pas significativement leur concentration.

1.3.2 Conclusions

Les conclusions obtenues par Hossain et al. (2001) confirment la raison pour laquelle les auteurs ont traditionnellement négligé l'échange de chaleur par radiation. En effet, la modélisation de la perte de chaleur par radiation n'a eu que peu d'effet sur la prédiction de la température ainsi que sur la concentration des espèces majeures (H_2O , CO et CO_2) avec ce type de configuration expérimentale. Par contre, la concentration en hydroxyde (OH) a été améliorée significativement en tenant compte de la radiation. L'auteur suggère finalement

l'utilisation d'un modèle de radiation plus avancé que le modèle WSGG utilisé, afin de confirmer les conclusions de ces travaux numériques.

1.4 Modèles de turbulence de deuxième ordre

Afin d'étudier plus en profondeur l'anisotropie de l'écoulement turbulent, Li et al. (2003) ont publié les résultats de leurs recherches numériques avec des modèles de turbulence de second ordre (Differential Reynolds Stress Model, DRSM) effectués en reproduisant le montage expérimental de Dally et al. (1998a). L'avantage de ces modèles vient du fait qu'ils contiennent une équation de transport supplémentaire permettant de décrire le transport du tenseur des contraintes de Reynolds. Dans cette équation, l'anisotropie est alors représentée à l'aide d'un terme spécifique, que l'on nommera ici corrélateur pression-déformation. Comme le mentionne Wouters et al. (1996), ce terme n'altère pas la création ou la destruction d'énergie cinétique, mais dicte plutôt comment l'énergie est distribuée dans l'ensemble des composantes du tenseur de contraintes de Reynolds.

Les auteurs ont étudié les performances de ces modèles autant pour les cas inertes que réactifs. Pour l'écoulement à froid, uniquement le cas air-air a été modélisé. En ce qui concerne l'écoulement réactif, la flamme étudiée ici correspondent au cas HM1E de Dally et al. (1998a). Dans cet article, les auteurs ont utilisé un code maison en conjonction avec des modèles de turbulence de second ordre présentés originalement par Launder (1989), (modèle LRR) Speziale et al. (1991), (modèle SSG) et Jones et Musonge (1988) (modèle JM). La modélisation de la combustion a été représentée avec une hypothèse d'équilibre chimique et de réaction infiniment rapide. Une fonction de densité de probabilité (PDF) a été utilisée pour représenter l'interaction entre la chimie et la turbulence. Le maillage utilisé dans cette simulation numérique est bidimensionnel. Les données expérimentales sont utilisées pour définir les profils des vitesses axiales ainsi que leurs fluctuations respectives à l'entrée de l'écoulement annulaire.

Afin de valider l'influence de la constante de dissipation et celle du corrélateur pression-déformation, les auteurs proposent deux modifications différentes et les comparent aux différents modèles de second ordre de la littérature. La première modification (appelée ici de BM-M1) correspond à celle proposée par Dally et al. (1998a) et fixe la constante de dissipation C_{e1} à 1.6. Li et al. (2003) proposent la même valeur pour C_{e1} mais cette fois, appliqué au modèle LRR. La nouveauté de cet article vient du second modèle (appelé modèle BM-M2) par rapport à la modification de la constante C_2 , du terme modélisant le corrélateur pression-déformation. Dans une seconde tentative d'améliorer les prédictions, la constante C_{e1} est remise à sa valeur initiale et la constante C_2 est modifiée à 0.7.

1.4.1 Résultats

Bien que les conclusions de cette étude soient différentes pour le cas inerte et réactif, les modifications BM-M1 et BM-M2 apportent une bonne amélioration quand elles sont comparées avec le modèle LRR classique. Plus spécifiquement, le modèle BM-M1 améliore les prédictions des vitesses axiales (U) et radiales (V), et ce autant pour le cas réactif qu'inerte. En ce qui concerne u' et v' , les améliorations de prédictions ne sont remarquées que dans le cas réactif. Seuls les modèles modifiés réussissent à bien décrire le taux de décroissance de la vitesse axiale pour les stations $X/D_B \leq 1.4$. Par contre, pour les régions de $X/D_B \geq 0.8$, les prédictions de u' et v' sont moins bonnes avec le modèle modifié BM-M1 qu'avec les modèles classique LRR et JM. Le modèle BM-M2 présente quant à lui de meilleures performances de prédictions autant pour U et V que u' et v' . Cette amélioration est sensiblement marquée dans les régions en aval de la zone de recirculation.

La première modification agissant sur la constante de dissipation aide à résoudre ce problème, mais en même temps détériore les résultats pour des distances radiales loin de l'axe principal. La seconde modification, agissant sur le terme du corrélateur pression-déformation responsable de l'anisotropie, rend le tenseur de contraintes de Reynolds moins sensible au gradient de vitesse très élevé dans la région du jet central. Cette dernière

modification permet d'améliorer la prédiction du champ de vitesse à des distances axiales supérieures tout en maintenant de bonnes prédictions dans la zone de recirculation.

En présence de combustion, ce sont les modèles modifiés qui fournissent les meilleures prédictions pour U , V , u' et v' . BM-M1 et BM-M2 fournissent également de bonnes prédictions du taux de décroissance de la vitesse axiale et ce, jusqu'à une distance axiale de $X/D_B = 1.4$. Plus en amont dans le domaine, le modèle BM-M2 fournit de meilleurs résultats. La supériorité du modèle BM-M2 observé dans le cas inerte n'est pas aussi prononcée que dans le cas de l'écoulement réactif. La double amélioration U , V et u' , v' apportée par le modèle BM-M2 rencontré dans l'écoulement inerte n'apporte pas les améliorations escomptées avec l'écoulement réactif. Les données expérimentales montrent que ce sont les modèles BM-M1 et SSG (pour lesquels la constante de dissipation a été modifiée) qui performant le mieux. Une fois de plus, cela montre que la turbulence est influencée par la présence de réactions chimiques ainsi que par la variation de masse volumique. Dû à l'agrandissement de la longueur de la zone de recirculation causé par l'écoulement réactif, l'impact relatif causé par la modification des constantes de dissipation ou du corrélateur pression-déformation est différent en présence de combustion. Pour cette raison, Li et al. (2003) remettent en doute la pertinence d'utiliser la modélisation RANS pour ce type d'écoulement.

Dans le cadre de l'hypothèse de chimie infiniment rapide, la température est fonction de z . Les meilleurs résultats de prédiction en température sont donc apportés par les modèles traduisant le plus fidèlement possible la fraction de mélange et ses fluctuations. Pour cette raison, les modèles BM-M1 et SSG apportent les meilleurs résultats. Dans la zone de cisaillement interne, localisée à la frontière entre les deux tourbillons contrarotatifs, la surestimation de Z mène à une sous-estimation de la température. Dans la zone de cisaillement central du jet, les températures sont surestimées. Plus en aval, dans le domaine i.e. $X/D_B = 0.9$ et $X/D_B = 1.3$, les températures sont mieux représentées et le modèle BM-M1 devient le plus performant.

1.4.2 Conclusions

Dans le cas réactif les modèles BM-M1 et BM-M2 performant de manière similaire dans la prédiction de toutes les caractéristiques du champ de vitesse. Par contre, dans la prédiction du scalaire Z et de ses fluctuations, les modèles BM-M1 et SSG sont respectivement les plus performant. En tenant compte de l'ensemble des prédictions, l'auteur privilégie alors le modèle BM-M1 pour simuler ce cas de combustion non prémélangée. Li et al. (2003) suggèrent finalement d'appliquer le modèle BM-M1 à des modèles de combustion plus complexes (flammelettes, PDF Monte Carlo, CMC) afin d'améliorer la prédiction des températures ainsi que des espèces chimiques.

1.5 Modèle de combustion de flammelettes

Dépendamment des conditions aux limites utilisées en laboratoire, la combustion non prémélangée présente différentes variétés de familles de flammes Borghi et Champion (2000). En plus de varier pour chaque cas expérimental, les types de flammes diffèrent également à l'intérieur des diverses régions d'une même flamme. Il est alors possible d'émettre l'hypothèse que certains modèles de combustion soient meilleurs que d'autres dépendamment de l'emplacement dans le domaine de calcul. D'après Williams (1985), le modèle d'éléments de flammes laminaires embouties dans un champ turbulent (modèle de flammelettes), a de la difficulté à représenter l'extinction locale (lorsque $Z \approx 0$ ou $Z \approx 1$). La qualité de prédiction de l'extinction locale est fondamentale dans la validité de ce modèle, puisqu'elle est directement liée aux prédictions de températures et espèces chimiques.

Afin de valider ce modèle, Hossain et Malalasekera (2005) ont publié un article exposant les résultats de leurs simulations numériques sur les flammes HM1E et HM3E de Dally et al. (1998b). Le Tableau 1.1 résume les cas expérimentaux des flammes de Dally et al. (1998b). Dans le but d'étendre la validité de leurs conclusions avec un plus grand nombre de données expérimentales possibles, les auteurs ont également choisi d'étudier la flamme HM3E, cas expérimental peu étudié à l'époque. Pour leurs simulations, la turbulence a été modélisée par le modèle classique k-epsilon modifié de Dally et al. (1998a). Le but de cette étude étant

d'identifier différents régimes de flamme et l'extinction locale, aucune analyse n'est faite par les auteurs en ce qui concerne le champ dynamique des écoulements inertes et/ou réactifs.

Tableau 1.1 Sommaire des cas expérimentaux de Dally et al. (1998b)

Cas expérimentaux	V_J (m/s)	V_{co} (m/s)
HM1	118	40
HM1E	108	35
HM2	178	40
HM3	214	40
HM3E	195	35

1.5.1 Résultats

Tel que décrit par Hossain et Malalasekera (2005) lorsque la vitesse du jet augmente (cas de flamme HM3E), le tourbillon intérieur diminue petit à petit pour s'intégrer au jet central. Quant au tourbillon extérieur, il devient de plus en plus court et diminue de largeur. Similairement aux conclusions de Dally et al. (1998a) toutes les prédictions caractéristiques de la combustion demeurent bonnes dans la zone de recirculation principale. Dans la zone de mélange intense, les caractéristiques de la flamme HM1E sont généralement mieux prédites que celle de la HM3E. En ce qui concerne la modélisation de la turbulence et, contrairement aux résultats obtenus par Dally et al. (1998a), l'ajustement de la constante $C_{\epsilon 1}$ n'a été bénéfique seulement que pour le cas HM3E. Dans le cas de HM1E, cet ajustement s'est avéré inadéquat. La discrétisation du maillage ainsi que la méthode de résolution numérique semblent donc avoir un effet important sur les constantes d'ajustement empirique.

La Figure 1.3 présente les données expérimentales ainsi que les prédictions de Hossain et Malalasekera (2005) pour les températures de flammes à différentes stations de mesure axiale. En comparant les cas HM1E et HM3E, des zones d'extinctions locales sont perceptibles (dû aux baisses de température) pour HM3E dans la zone de mélange intense (à partir de $x/D = 0.9$). En comparant les prévisions de Z et z' , les performances de prédiction diminuent dans ces mêmes stations de la zone de mélange. L'auteur émet l'hypothèse que le

modèle flammelette ne réussit pas à bien modéliser l'extinction locale dans cette région en particulier de la flamme HM3E.

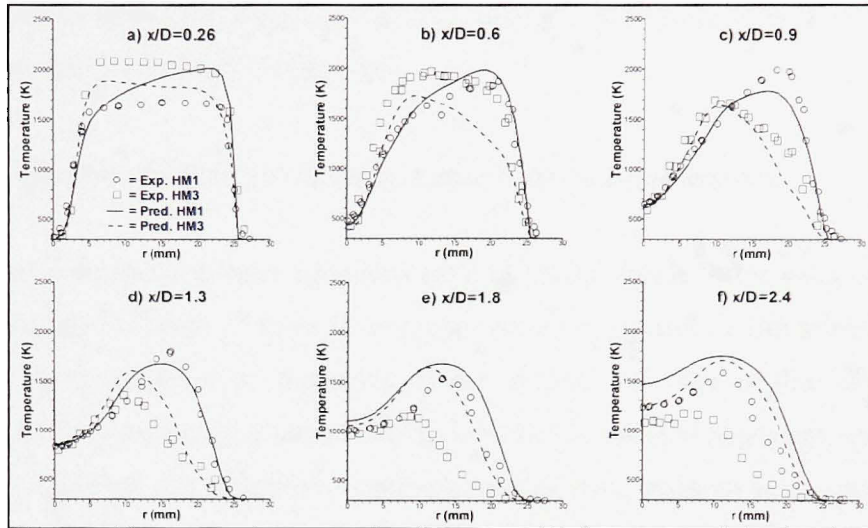


Figure 1.3 Comparaison des profils de températures expérimentales et numériques de Hossain des flammes HM1 et HM3. (Tiré de Hossain, 2005, p. 367)

1.5.2 Conclusions

Les auteurs concluent que l'extinction locale de HM3E pourrait être causée par de grandes fluctuations du taux de dissipation du scalaire $\tilde{\chi}$. D'autres auteurs ont également démontré expérimentalement (Donbar et al. (2001)) et numériquement (Pitsh et al. (1998a), Pitsh et Steiner (2000)) cette hypothèse en concluant que lorsque le taux de déformation du scalaire passif ($\tilde{\chi}$) local est supérieur à la limite d'extinction, un refroidissement local suivit d'une baisse de la température peut arriver. Hossain et Malalasekera (2005) suggèrent ainsi qu'il serait important d'implémenter un modèle de combustion tenant compte de la fluctuation de $\tilde{\chi}$ en utilisant des simulations LES/DNS et de valider une fois de plus la pertinence du modèle de flammelettes pour ce type de flamme.

Tout comme dans le travail de Dally et al. (1998a) le modèle classique k-epsilon utilisé ici était trop dissipatif en diffusant trop rapidement la fraction de mélange Z . Dans le cas de ce brûleur non prémélangé, cela s'est traduit par une surestimation de la décroissance de la vitesse du jet central. Hossain et Malalasekera (2005) mentionnent qu'il est important de

s'assurer d'une bonne représentation de l'écoulement avant d'évaluer les modèles de combustion. À ce sujet, Raman et Pitsch (2005) ont publié un article utilisant les simulations aux grandes échelles (LES) pour reproduire la flamme HM1E et de bonnes prédictions ont pu être atteinte dans l'ensemble du domaine.

1.6 Modèles algébrique explicite et approche de flammelettes

L'avantage des modèles à deux équations est qu'ils sont simples à résoudre numériquement et demeurent très robustes. Comme ils se rapportent à l'hypothèse de Boussinesq pour décrire le tenseur de contraintes de Reynolds, il est difficile de bien prédire les écoulements turbulents non-isotropique (Launder (1989)). Les modèles DRSM apportent, quant à eux, une meilleure prédiction des structures turbulentes complexes, mais en même temps sont plus coûteux à résoudre numériquement, dû à une équation de transport supplémentaire à résoudre. Tout comme les modèles de deuxième ordre, le modèle EASM possède une équation de transport pour le transport du tenseur de Reynolds. Au lieu de résoudre l'équation différentielle partielle avec les méthodes numériques traditionnelles, ce modèle utilise une formulation algébrique explicite rendant ainsi la résolution moins coûteuse en terme de calcul.

Dans leur article, Yan et al. (2004) proposent l'utilisation du modèle EASM (explicit algebraic stress model) pour étudier le cas de combustion turbulente du brûleur de Dally et al. (1998a) en le comparant avec le modèle classique k-epsilon. Les détails du modèle EASM ne seront pas exposés ici, mais celui-ci est une dérivée d'un des premier modèles développés par Rodi (1976). La combustion est modélisée ici avec l'approche de flammelettes en tenant compte de la perte de chaleur par radiation.

1.6.1 Résultats

Dans l'article de Yan et al. (2004), les résultats numériques du champ de vitesse sont présentés uniquement le long de l'axe longitudinal du brûleur pour le cas réactif. Bien que les résultats numériques des deux types de modèles soient très similaires, la vitesse moyenne le

long de l'axe central est surestimée dans la zone de recirculation ($X/D_B \leq 0.9$) alors qu'elle tend à être sous-estimée dans les stations plus en aval. Pour ce qui est des fluctuations de vitesse, le modèle traditionnel k-epsilon apporte généralement de meilleurs résultats pour toutes les stations de mesures.

En ce qui concerne les prédictions de la fraction de mélange moyenne, celles-ci sont relativement bonnes pour toutes les stations de mesures et l'influence du modèle de turbulence semble avoir peu d'effet sur les résultats. En comparant le modèle traditionnel avec le modèle EASM, ce dernier apporte de meilleures prédictions de la fluctuation de Z pour les stations $X/D_B \geq 1.8$. Cette caractéristique s'applique également à la distribution des températures. En effet, même si tous les modèles apportent une relativement bonne concordance avec les températures expérimentales, le modèle EARSIM commence à se démarquer à partir de $X/D_B = 0.9$. La région de transition entre la zone de recirculation et la zone de mélange ($0.9 \leq X/D_B \leq 1.3$) définie à la Figure 1.1 est par contre marquée par une sous estimation importante de la température maximale (environ 250 K). Pour la prédiction des espèces chimiques, le H_2O est généralement bien prédit pour toutes les stations de mesures, alors que le CO_2 est sous estimé dans la zone ($X/D_B \leq 1.3$). La supériorité du modèle EASM s'applique également pour la prédiction de la concentration des espèces pour les stations $X/D_B \geq 1.8$.

1.6.2 Conclusions

Les lignes de courant du modèle EASM obtenu par Yan et al. (2004), démontrent clairement que le modèle EASM permet de rallonger les zones de recirculation contra-rotatives. Cette meilleure description du transport turbulent se traduit par une dissipation d'énergie cinétique moins grande qu'avec le modèle k-epsilon classique. Concrètement, le calcul explicite-algébrique du tenseur de contraintes de Reynolds permet une meilleure prédiction des quantités scalaires pour les stations plus en aval du brûleur. Ce type de modèle représente donc un bon compromis, car il permet de décrire un certain niveau d'anisotropie de l'écoulement tout en demeurant économique en terme de coût de calcul.

1.7 Modèles de deuxième ordre et approche de flammelettes

Même si l'approche utilisée par Li et al. (2003) offre une meilleure représentation de la turbulence grâce au modèle de turbulence de deuxième ordre, le modèle de combustion utilisé par ces derniers auteurs réussit moins bien à décrire les propriétés thermo-chimiques de la flamme. Pour pallier à ce problème, Ravikanti et al. (2009) proposent une étude numérique se basant également sur le modèle de Launder et al. (1975), mais en utilisant la modélisation de flammelettes pour décrire le processus chimique. En comparant les travaux de Hossain et Malalasekera (2005), une importante amélioration a été apportée dans la génération de la bibliothèque de flamme. En effet, en plus d'utiliser le mécanisme simplifié de Peters (1993), Ravikanti et al. (2009) ont utilisé les mécanismes détaillés GRI-MECH 2.11 (Bowman et al.) et GRI-MECH 3.0 (Smith et al.) comprenant respectivement 49 espèces/277 réactions et 53 espèces/320 réactions. Le but visé par Ravikanti et al. (2009) en utilisant une bibliothèque construite à partir de mécanismes détaillés était non seulement d'améliorer les prédictions en température et concentration d'espèces majeures, mais également d'améliorer celles des espèces mineures. Par exemple, en utilisant une représentation chimique plus complexe, la formation des NO_x est mieux décrite, car elle modélise de manière plus précise les différents chemins de formation des NO_x.

1.7.1 Résultats

Les prédictions des vitesses axiales et radiales moyennes de l'écoulement inerte du montage expérimental de Dally et al. (1998a) sont relativement bonnes pour toutes les stations de mesures et peu de différence sont perceptibles entre les modèles *k*- ϵ et LRR utilisés par l'auteur. De manière similaire aux autres ouvrages de cette revue de littérature, la vitesse longitudinale le long de l'axe central continue d'être sous-estimée dans les stations en aval de la sortie du jet. En ce qui concerne les variations de vitesse, les fluctuations des vitesses axiales sont sous-estimées, alors que celles des vitesses radiales sont surestimées. En

comparant les modèles de turbulence, le modèle LRR apporte une amélioration sur les fluctuations des deux composantes de la vitesse.

Pour l'écoulement réactif, les prédictions de la fraction de mélange sont bonnes, pour les régions axiales inférieures à $X/D_B \leq 1.3$. Cette région de validité de Z suit également la même tendance que la majorité des autres résultats de la littérature. Pour le moment, seules les simulations aux grandes échelles de Raman et Pitsch (2005), ayant utilisé un procédé récursif de raffinement de filtre, ont réussi à bien décrire les propriétés thermochimique dans des stations supérieures à $X/D_B = 1.4$. La concordance de la fluctuation de Z avec les données expérimentales est, quant à elle, un peu moins bonne, mais représente tout de même une amélioration notable par rapport aux résultats de Li et al. (2003), Yan et al. (2004) et Kempf et al. (2006). La fraction de mélange demeure toutefois surestimée dans la région radiale de la zone de recirculation extérieure. Les températures et concentration en H_2O sont relativement bien prédites pour l'ensemble des stations de mesures et les mécanismes de réactions semblent avoir peu d'influence sur les résultats. Les résultats pour le CO_2 sont un peu moins bons et commencent à se dégrader à partir de $X/D_B = 0.9$. Alors que les mécanismes détaillés produisent de bons résultats pour les prédictions de CO pour $X/D_B \leq 0.9$, le mécanisme simplifié Peters (1993) sous-estime quant à lui, la concentration à toutes les stations. La concentration en hydroxyde (OH) est bien prédit plus en aval dans le domaine, ($X/D_B \geq 1.3$) alors qu'en amont, la largeur radiale de la zone de production de OH est surestimée. En ce qui concerne la prédiction des NO , le mécanisme GRI-2.11 produit les meilleurs résultats. Alors que les concentrations sont bien prédites près de la face du brûleur, i.e. $X/D_B \leq 0.9$, elles sont surestimées en aval et dans une région se rapprochant de l'axe central. Alors que le mécanisme de Peters (1993) sous-estime dans tous les cas d'environ 50% les NO , le mécanisme GRI-3.0 surestime fortement la production du polluant.

1.7.2 Conclusions

Dans leur article, Ravikanti et al. (2009) soulignent l'importance du canal d'entrée dans l'amélioration des résultats. L'imposition d'une distance de développement à l'écoulement

semble diminuer l'effet des conditions aux limites à l'entrée et améliorer les résultats numériques. À ce sujet, les auteurs mentionnent une importante source d'erreur quant aux incertitudes des conditions aux limites de l'écoulement annulaire. En effet, contrairement à l'écoulement du jet qui semble pouvoir se développer complètement avant de sortir à la face du brûleur, il en est tout autrement pour l'écoulement annulaire. Selon Ravikanti et al. (2009), ces incertitudes des conditions aux frontières jouent un rôle essentiel dans la formation du tourbillon extérieur et, tout particulièrement, près de la surface du brûleur. Pour cette raison, plusieurs propriétés thermochimiques de cette région, i.e. $X/D_B = 0.26$, sont souvent mal prédites. Ravikanti et al. (2009) affirment que l'utilisation du mécanisme GRI-2.11 apporte une grande amélioration pour la prédiction des NO, en comparaison avec les mécanisme GRI-MECH 3.0. Finalement, il conclut que l'utilisation d'une bibliothèque de flamme transitoire ainsi que l'application de la perte de chaleur par radiation (non tenu pour compte dans son ouvrage) pourraient contribuer à améliorer les prédictions en NO.

1.8 Bibliothèque de flamme transitoire

En 2007, Odedra et Malalasekera (2007) publièrent un article avec un contenu très similaire à celui de Ravikanti et al. (2009). En effet, Odedra et Malalasekera (2007) ont simulé la flamme HM1 en utilisant les mêmes mécanismes de cinétique chimique ainsi que les mêmes modèles de turbulence et de combustion que Ravikanti et al. (2009). Les différences majeures du travail de Odedra et Malalasekera (2007) se situent principalement au niveau de l'utilisation d'une bibliothèque supplémentaire de flamme transitoire ainsi que dans la description des conditions aux limites de l'écoulement. La construction de la bibliothèque de flamme transitoire est un processus totalement découplé de la mécanique des fluides et consiste en un post-traitement des résultats scalaires et vectoriels obtenus en régime permanent.

Le concept d'une bibliothèque transitoire est d'introduire dans l'écoulement des particules pouvant représenter des éléments de flammelettes. La probabilité de trouver une telle particule dans l'écoulement est alors résolue avec une équation transitoire eulérienne de

transport de probabilité. Cette probabilité est ensuite utilisée afin de trouver le taux de dissipation scalaire $\tilde{\chi}_{st}$ à la stœchiométrie selon la méthode proposée par Pitsh et al. (1998b). Cette construction de la bibliothèque est transitoire, car la bibliothèque de flammes est construite à partir des valeurs transitoires de $\tilde{\chi}$ enregistrées à chaque itérations.

1.8.1 Résultats

Les prédictions scalaires et vectorielles obtenues par Odedra et Malalasekera (2007) sont généralement plus fidèles aux données expérimentales que celles de Ravikanti et al. (2009). En ne tenant pas compte de la bibliothèque de flamme transitoire, les deux auteurs ont utilisés presque tous les mêmes modèles mais ont obtenues des résultats numériques quelques peu différents. Les prédictions scalaires et vectorielles obtenues par Odedra et Malalasekera (2007) sont généralement plus fidèles aux données expérimentales que celles de Ravikanti et al. (2009). Bien que ces deux articles aient utilisé des codes numériques et des maillages distincts pour résoudre l'écoulement, la différence majeure entre les deux travaux numériques vient des conditions aux limites utilisées pour résoudre l'écoulement. Afin de laisser développer l'écoulement annulaire, Ravikanti et al. (2009) et Odedra et Malalasekera (2007) ont utilisé des longueurs de développement annulaires différentes, respectivement de 150 et 100 mm. Afin de décrire la turbulence de l'écoulement annulaire, Ravikanti et al. (2009) ont imposé un profil logarithmique alors que Odedra et Malalasekera (2007) ont quant à eux établi un intensité d'énergie turbulente arbitraire de 10% répartie uniformément.

En comparant les deux types de bibliothèques de flamme utilisées, Odedra et Malalasekera (2007) concluent que la bibliothèque transitoire n'apporte pas d'amélioration dans la prédiction de la majeure partie des espèces chimiques, excepté pour le NO. Tel que mentionné par Odedra et Malalasekera (2007), comme les NO sont formés selon une échelle de temps très différentes de la majeure partie des autres espèces, l'approche transitoire pour calculer $\tilde{\chi}_{st}$ permet de mieux représenter le phénomène chimique de formation de cette espèce.

1.8.2 Conclusions

Les conclusions proposées par Ravikanti et al. (2009), quant à l'importance cruciale de bien décrire les conditions aux limites de l'écoulement latéral, ont également été présentées par Odedra et Malalasekera (2007). En effet, en utilisant des mécanismes chimiques, des modèles de combustion et de turbulence similaires, les deux auteurs ont montré l'influence directe de l'écoulement annulaire sur les prédictions réactives de l'écoulement. Odedra et Malalasekera (2007), en utilisant une longueur de développement de 100 mm et en imposant aucun un profil de vitesse axiale annulaire uniforme, sont arrivés à de meilleurs résultats scalaires et vectoriels. Contrairement à ce qui a été proposé par Ravikanti et al. (2009), l'utilisation d'une bibliothèque de flamme transitoire n'a pas permis d'améliorer la prédiction des espèces chimiques à l'exception des NO.

1.9 Orientation du sujet de recherche

En fonction des conclusions tirées lors de cette revue de littérature, la présente section introduira sommairement la structure de ce mémoire. Dans le but de valider le plus de cas possible, les écoulements de ce travail seront simulés à l'aide du logiciel CFX-5.7. Comme ce type de programme est utilisé en industrie, il sera pertinent de valider les résultats et les limitations qu'offrent ce type d'outil CFD.

L'objectif principal de ce mémoire est de valider l'effet des conditions aux limites de l'écoulement annulaire sur les variables scalaires et vectorielles de l'écoulement turbulent réactif. En suivant la méthodologie permettant de remplir cet objectif, une première validation de certains modèles de turbulence doit préalablement être faites. Théoriquement tous les modèles de turbulence devraient être validés pour le cas réactif, afin de valider si le modèle le plus performant de l'écoulement inerte l'est également pour l'écoulement réactif. Toutefois, en tenant compte de l'objectif principal de ce mémoire et du niveau de performance face au caractère dissipatif de certains modèles de turbulence (Dally et al. (1998a), Hossain et Malalasekera (2005)), un seul modèle sera retenu pour l'écoulement réactif.

Ainsi, afin de valider les modèles de turbulence, des simulations seront premièrement effectuées sur l'écoulement inerte du brûleur de Dally et al. (1998a). Dans un premier temps, les modèles classiques k-epsilon et SST seront évalués. Il est important de noter que le modèle k-epsilon modifié proposé par Dally et al. (1998a) ne sera pas présenté directement dans ce travail, car après une étude numérique préliminaire, la modification du modèle k-epsilon classique n'a pas apporté d'améliorations significatives.

Tel qu'observé par Hossain et Malalasekera (2003), l'écoulement de ce type de brûleur est isotropique et plusieurs temps caractéristiques (chimie et turbulence) le décrivent. Dans le but d'améliorer la description de l'anisotropie, les modèles de second ordre proposés par Li et al. (2003) seront également utilisés dans ce travail. Finalement, le concept de modèle EARSM introduit initialement par Rodi (1976), et appliqué par Wallin et Johansson (2000) sera présenté. La nouveauté de ce modèle est qu'il permet de calculer l'anisotropie de l'écoulement en résolvant l'équation du transport de tenseur de contraintes de Reynolds d'une manière algébrique, réduisant ainsi de manière considérable l'effort de calcul.

Dans un deuxième temps, l'écoulement réactif sera modélisé en utilisant le modèle de combustion de flammelettes. Pour ce faire, la bibliothèque de flammes, servant à décrire les quantités scalaires, sera bâtie à l'aide des mécanismes de réactions fournies par Peters (1993) dans le logiciel CFX-RIF.

Tel que mentionné par plusieurs auteurs dont Ravikanti et al. (2009) et Raman et Pitsch (2005), les conditions aux limites d'entrée sont très importantes afin d'assurer une bonne prédiction en aval de la face du brûleur. Contrairement au jet central qui peut être considéré selon un profil de vitesse pleinement développé, les conditions d'entrée du canal annulaire sont beaucoup plus difficiles à décrire. En effet, comme l'écoulement de cette région ne peut pas être considéré comme pleinement développé en tenant compte de la géométrie expérimentale, plusieurs hypothèses peuvent être utilisées. Ainsi, plusieurs auteurs ont imposé des profils de vitesse et de turbulence constants, mais chacun d'entre eux ont utilisé

des longueurs de développement annulaire différentes (Dally et al. (1998a) 100mm; Hossain et al. (2001) 0mm; Li et al. (2003) 0mm; Yan et al. (2004) 50mm; Raman et Pitsch (2005) 10mm). Jusqu'à maintenant, peu de travaux se sont concentrés sur l'effet de la longueur du canal annulaire proprement dit ou sur la turbulence de l'écoulement. Ainsi, des cas réactifs avec des canaux annulaires de 25mm 50mm et 100mm seront analysés. Enfin, un dernier cas sans canal de développement annulaire, et pour lequel les conditions d'entrée ont été imposées selon les profils de vitesse et d'énergie cinétique turbulente expérimentales disponibles, sera étudié.

Même si une seconde flamme HM1E ($V_j = 108$ m/s et $V_{co} = 35$ m/s) a été créée afin de pallier au manque d'homogénéité de l'écoulement annulaire du cas HM1, c'est ce dernier cas qui sera analysé dans le mémoire. En effet, dans un souci de consistance des données expérimentales utilisées et comme les espèces chimiques et températures ont été mesurées seulement que pour le cas HM1, l'étude du champ de vitesse de l'écoulement sera également basée sur ce même cas réactif.

CHAPITRE 2

FONDEMENTS THÉORIQUES

Dans ce chapitre, les fondements théoriques sur lesquels se baseront ce travail seront exposés. Les équations gouvernant la mécanique des fluides et la turbulence seront présentées dans un premier temps, tandis que le modèle de combustion choisi pour ce travail sera présenté en deuxième temps. Comme une révision théorique des concepts fondamentaux de la mécanique des fluides serait en dehors des objectifs de ce travail, les équations de conservation seront présentées ici directement. Pour plus de détails le lecteur peut consulter Poinot et Veynante (2005). L'emphase sera plutôt mis ici sur la description du phénomène de turbulence et son interaction avec la combustion.

2.1 Équations de conservation

Un des objectifs des codes numériques de mécanique des fluides de base est de résoudre les équations de Navier-Stokes de conservation de masse, de quantité de mouvement, d'énergie et d'espèce. Elles sont respectivement (Poinot et Veynante (2005)):

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i) = 0 \quad (2.1)$$

$$\frac{\partial (\rho u_j)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i u_j) + \frac{\partial p}{\partial x_j} = \rho g_j + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_i} \quad (2.2)$$

$$\frac{\partial (\rho Y_k)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i Y_k) = - \frac{\partial}{\partial x_i} (V_{k,i} Y_k) + \dot{\omega}_k \quad (2.3)$$

$$\frac{\partial \rho h_s}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i h_s) = \dot{\omega}_T + \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} + u_i \frac{\partial \rho}{\partial x_i} \right) + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho \sum_{k=1}^N V_{k,i} Y_k h_{s,k} \right) + \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \quad (2.4)$$

Avec :

$$\tau_{ij} = \left[\mu \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) - \frac{2}{3} \mu \left(\frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right) \delta_{ij} \right] \quad (2.5)$$

Où : ρ = masse volumique de l'écoulement

t = temps

u_i, u_j, u_k = composante de vitesse de l'écoulement dans la direction i, j ou k

x_i, x_j, x_k = direction de l'écoulement selon les axes i, j ou k

i, j, k = composantes individuelles de l'écoulement pouvant varier de 1 à 3 ,
représentant respectivement les axes X, Y et Z

p = pression

g = constante de gravité

μ = viscosité dynamique

Y_k = Fraction massique de l'espèce k

$\dot{\omega}_k$ = Taux de réaction de l'espèce k

$V_{k,i} Y_k$ = Flux laminaire diffusif de l'espèce Y_k

h_s = enthalpie totale

$\dot{\omega}_T$ = Terme source de chaleur du à la combustion

λ = Coefficient de diffusivité thermique

$V_{k,i} Y_k h_{s,k}$ = Flux laminaire diffusif d'enthalpie totale de l'espèce Y_k

δ_{ij} = delta de kronecker

2.2 Modélisation de la turbulence

Hinze (1975) a défini la turbulence comme étant :

“Le mouvement turbulent d'un fluide est une condition irrégulière de l'écoulement pour laquelle les quantités impliquées présentent une variation aléatoire dans le temps et l'espace, telle que les valeurs statistiques peuvent être différenciées des valeurs moyennes.”

La Figure 2.1 présente comment la turbulence peut être interprétée en fonction d'une vitesse moyenne plus une certaine variation Nieckle (2006). Cette décomposition de la vitesse ($u = \bar{u} + u'$) est également appelée décomposition de Reynolds et permet l'utilisation d'outils statistiques afin de décrire l'écoulement. En utilisant ce concept et en se basant sur la définition d'une valeur moyenne (ϕ étant une variable quelconque et $\bar{\phi}$ sa valeur moyenne) se définit comme suit:

$$\bar{\phi} = \frac{1}{\Delta t} \int_{\Delta t} \phi dt \quad (2.6)$$

Où Δt représente un différentiel de temps.

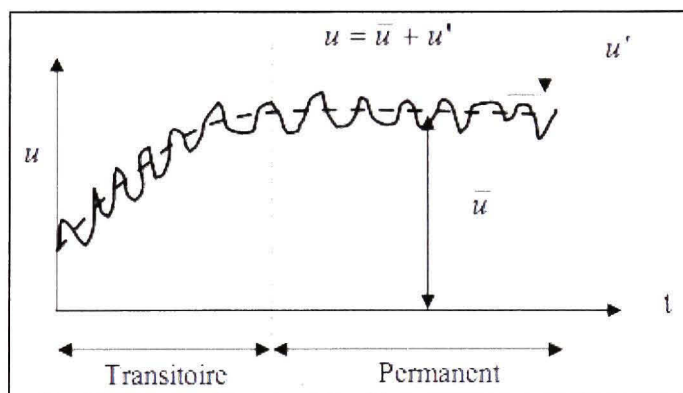


Figure 2.1 Vitesse instantanée et valeur moyenne dans le temps.
(Adapté de Nieckle 2006, p. 16)

Favre (1969) propose une simplification mathématique (et non physique) permettant d'éliminer les fluctuations de densité dans les équations de conservation (2.1) à (2.4). Il introduit alors la notion de moyenne pondérée en fonction d'une variable ϕ quelconque:

$$\tilde{\phi} = \frac{1}{\bar{\rho}} \lim_{t \rightarrow \infty} \int_0^t \rho(x,t) \phi(x,t) dt \quad (2.7)$$

Où : $\bar{\rho}$ = densité moyenne.

La décomposition de Favre est maintenant définie comme :

$$\phi = \tilde{\phi} + \phi'' \quad (2.8)$$

Où : $\tilde{\phi}$ = moyenne pondérée d'une variable quelconque

ϕ'' = la fluctuation de cette même variable.

En se servant du moyennage de Favre présenté en (2.7), les équations de conservation deviennent (Poinsot et Veynante (2005)):

Équation de conservation de la masse

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i) = 0 \quad (2.9)$$

Équation de conservation de la quantité de mouvement

$$\frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{u}_i)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j) + \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\tau}_{ij} - \bar{\rho} \widetilde{u_i u_j}) \quad (2.10)$$

Équation de conservation des espèces chimiques

$$\frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{Y}_k)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{Y}_k) = - \frac{\partial}{\partial x_i} (\overline{V_{k,i} Y_k} + \bar{\rho} \widetilde{u_i Y_k}) + \bar{\omega}_k \quad (2.11)$$

Équation de conservation d'énergie

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{h}_s}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{h}_s) &= \bar{\omega}_T + \left(\frac{\partial \bar{p}}{\partial t} + u_i \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + u_i'' \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} \right) + \\ &\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\overline{\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i}} - \overline{\rho u_i'' h_s''} \right) - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\overline{\rho \sum_{k=1}^N V_{k,i} Y_k h_{s,k}} \right) + \overline{\tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j}} \end{aligned} \quad (2.12)$$

2.3 Modélisation des termes ouverts

Un des objectifs de la simulation de combustion turbulente est de trouver des modèles et des méthodes numériques afin de résoudre et fermer les équations (2.9) à (2.12) numériquement.

Les principaux termes à modéliser sont :

1. Tenseur de contraintes de Reynolds, $\overline{u_i u_j}$: Ce tenseur sera fermé à l'aide des modèles de turbulence présentés en aval,
2. Flux turbulent d'espèce et d'enthalpie : $\overline{u_i Y_k}$ et $\overline{u_i h_s}$: Ces flux turbulents sont souvent résolus en utilisant une hypothèse de gradient telle que :

$$\overline{u_i Y_k} = - \frac{\mu_t}{Sc_{kt}} \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial x_i} \quad (2.13)$$

Où : Sc_{kt} est le numéro de Schmidt turbulent de l'espèce k

3. Flux de diffusion laminaire d'espèce et d'enthalpie $\overline{V_{k,i} Y_k}$:

$$\overline{V_{k,i} Y_k} \approx - \bar{\rho} \bar{D}_k \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial x_i} \quad (2.14)$$

Où : \bar{D}_k est un coefficient de diffusion moléculaire moyen de l'espèce k

4. La corrélation pression-vitesse $\overline{u_i \frac{\partial p}{\partial x_i}}$: Dans la plupart des codes RANS, ce terme est négligé Poinso et Veynante (2005).
5. Taux de production des espèces chimiques $\bar{\omega}_k$: Ce terme représente un des objectifs fondamentaux de la modélisation de la combustion. Dans le cadre de ce travail, il sera représenté à l'aide du modèle de flammelettes.

2.4 Modèles de viscosité cinétique turbulente pour le tenseur de contraintes de Reynolds

Le concept de la viscosité dynamique turbulente, μ_t , a été introduit à partir de la notion d'isotropie de l'écoulement de Boussinesq (1877). Il propose alors une analogie entre les contraintes turbulentes et celles qui existent dans le régime laminaire. Pour un fluide newtonien en régime laminaire, le tenseur τ_{ij} est défini comme Poinso et Veynante (2005):

$$\tau_{ij} = \mu_t \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \mu_t \left(\frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right) \delta_{ij} \quad (2.15)$$

1. Tenseur de contraintes de Reynolds, $\overline{u_i u_j}$: Ce tenseur sera fermé à l'aide des modèles de turbulence présentés en aval,
2. Flux turbulent d'espèce et d'enthalpie : $\overline{u_i Y_k}$ et $\overline{u_i h_s}$: Ces flux turbulents sont souvent résolus en utilisant une hypothèse de gradient telle que :

$$\overline{u_i Y_k} = - \frac{\mu_t}{Sc_{kt}} \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial x_i} \quad (2.13)$$

Où : Sc_{kt} est le numéro de Schmidt turbulent de l'espèce k

3. Flux de diffusion laminaire d'espèce et d'enthalpie $\overline{V_{k,i} Y_k}$:

$$\overline{V_{k,i} Y_k} \approx - \bar{\rho} \bar{D}_k \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial x_i} \quad (2.14)$$

Où : \bar{D}_k est un coefficient de diffusion moléculaire moyen de l'espèce k

4. La corrélation pression-vitesse $\overline{u_i \frac{\partial p}{\partial x_i}}$: Dans la plupart des codes RANS, ce terme est négligé Poinso et Veynante (2005).
5. Taux de production des espèces chimiques $\bar{\omega}_k$: Ce terme représente un des objectifs fondamentaux de la modélisation de la combustion. Dans le cadre de ce travail, il sera représenté à l'aide du modèle de flammelettes.

2.4 Modèles de viscosité cinétique turbulente pour le tenseur de contraintes de Reynolds

Le concept de la viscosité dynamique turbulente, μ_t , a été introduit à partir de la notion d'isotropie de l'écoulement de Boussinesq (1877). Il propose alors une analogie entre les contraintes turbulentes et celles qui existent dans le régime laminaire. Pour un fluide newtonien en régime laminaire, le tenseur τ_{ij} est défini comme Poinso et Veynante (2005):

$$\tau_{ij} = \mu_t \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \mu_t \left(\frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right) \delta_{ij} \quad (2.15)$$

En faisant l'analogie avec (2.2), le tenseur de contraintes de Reynolds devient alors

$$-\rho \overline{u_i u_j} = \mu_t \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \mu_t \left(\frac{\partial \bar{u}_k}{\partial x_k} \right) \delta_{ij} - \frac{2}{3} \rho \kappa \delta_{ij} \quad (2.16)$$

Avec l'énergie cinétique turbulente k définie comme

$$\kappa = \frac{1}{2} \left(\overline{u_i'^2} + \overline{u_j'^2} + \overline{u_k'^2} \right) \quad (2.17)$$

2.4.1 Modèle k-epsilon

Le modèle k-epsilon suppose que le tenseur de contraintes de Reynolds est proportionnel au gradient de la vitesse moyenne, utilisant la viscosité turbulente (μ_t) comme constante de proportionnalité (équation 2.16). Cette supposition est connue comme l'hypothèse de Boussinesq. Afin de pouvoir calculer le tenseur de contraintes de Reynolds, une équation supplémentaire doit être fournie pour μ_t . Utilisant le modèle k-epsilon μ_t est défini selon Wilcox (2000):

$$\mu_t = \rho C_\mu \frac{\kappa^2}{\varepsilon} \quad (2.18)$$

Où $C_\mu = 0.09$ = constante de proportionnalité empirique

ε = Dissipation d'énergie cinétique de turbulence

Les valeurs de k et ε de (2.18) sont obtenues à partir des équations de transport pour k et ε .

En notation indicielle ces équations sont respectivement : (ANSYS_inc (2009))

$$\rho \frac{\partial \kappa}{\partial t} + \rho \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{u_j \kappa}) = P_\kappa + \left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\kappa} \right) \frac{\partial^2 \kappa}{\partial x_j \partial x_j} - \rho \varepsilon \quad (2.19)$$

Où : P_κ = production d'énergie cinétique modélisée par :

$$P_\kappa = \mu_t \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} \quad (2.20)$$

$$\rho \frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \rho \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{u_j \varepsilon}) = P_\varepsilon + \left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial x_j^2} + \frac{\varepsilon}{\kappa} (C_{\varepsilon 1} P_\kappa - C_{\varepsilon 2} \rho \varepsilon) \quad (2.21)$$

Où : $C_{\varepsilon 1}, C_{\varepsilon 2} =$ constantes empiriques

σ_k et $\sigma_\varepsilon =$ constantes empiriques représentant physiquement les nombres de Prandtl gouvernant la diffusion turbulente de k et ε .

2.4.2 Modèle k- ω

Très similaire au modèle k-epsilon, le modèle k-omega a été développé par Wilcox (1988) afin d'améliorer le traitement de la viscosité près de la paroi Pope (2000). Omega peut être défini comme le taux de dissipation spécifique, ou plus simplement, ε/k . Avec le modèle k- ω la viscosité turbulente est maintenant définie :

$$\mu_t = \alpha^* \frac{\rho \kappa}{\omega} \quad (2.22)$$

Où :

$$\alpha^* = \alpha_\infty^* \left(\frac{\alpha_0^* + \text{Re}_t / R_\kappa}{1 + \text{Re}_t / R_\kappa} \right) \quad (2.23)$$

Avec :

$$\text{Re}_t = \frac{\rho \kappa}{\mu \omega} \quad (2.24)$$

Avec : $R_\kappa = 6$

$$\alpha_0^* = 0.024$$

$$\alpha_\infty^* = 1$$

Similairement au modèle k-epsilon, le modèle k- ω possède deux équations de transport pour k et ω qui sont respectivement ANSYS_inc (2009) :

$$\rho \frac{\partial \kappa}{\partial t} + \rho \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{u_j \kappa}) = P_\kappa + \left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\kappa} \right) \frac{\partial^2 \kappa}{\partial x_j^2} - \beta' \rho \kappa \omega \quad (2.25)$$

Où : $C_{\varepsilon 1}, C_{\varepsilon 2} =$ constantes empiriques

σ_k et $\sigma_\varepsilon =$ constantes empiriques représentant physiquement les nombres de Prandtl gouvernant la diffusion turbulente de k et ε .

2.4.2 Modèle k- ω

Très similaire au modèle k-epsilon, le modèle k-omega a été développé par Wilcox (1988) afin d'améliorer le traitement de la viscosité près de la paroi Pope (2000). Omega peut être défini comme le taux de dissipation spécifique, ou plus simplement, ε/k . Avec le modèle k- ω la viscosité turbulente est maintenant définie :

$$\mu_t = \alpha^* \frac{\rho \kappa}{\omega} \quad (2.22)$$

Où :

$$\alpha^* = \alpha_\infty^* \left(\frac{\alpha_o^* + Re_t / R_\kappa}{1 + Re_t / R_\kappa} \right) \quad (2.23)$$

Avec :

$$Re_t = \frac{\rho \kappa}{\mu \omega} \quad (2.24)$$

Avec : $R_\kappa = 6$

$$\alpha_o^* = 0.024$$

$$\alpha_\infty^* = 1$$

Similairement au modèle k-epsilon, le modèle k- ω possède deux équations de transport pour k et ω qui sont respectivement ANSYS_inc (2009) :

$$\rho \frac{\partial \kappa}{\partial t} + \rho \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{u_j \kappa}) = P_\kappa + \left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\kappa} \right) \frac{\partial^2 \kappa}{\partial x_j^2} - \beta' \rho \kappa \omega \quad (2.25)$$

$$\rho \frac{\partial \omega}{\partial t} + \rho \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{u_j \omega}) = P_\kappa + \left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\omega} \right) \frac{\partial^2 \kappa}{\partial x_j^2} + \alpha \frac{\omega}{\kappa} P_\kappa - \beta' \rho \omega^2 \quad (2.26)$$

Avec : $\beta' = 0.09$

$\alpha = 5/9$

$\sigma_\kappa = \sigma_\omega = 2$

2.4.3 Modèle SST

Menter (1994) présente le modèle SST qui est un modèle hybride entre les k-epsilon et k-omega. En effet, ce modèle est plus polyvalent, car il prend la formulation de k-omega près des parois (où k-omega est le plus précis) et utilise k-epsilon dans les régions d'écoulement libre. Il combine alors l'avantage de bonnes prédictions près des murs, tout en gardant les performances du modèle k-epsilon quant à la bonne représentation des gradients de pression inverse. En utilisant ce modèle, le transport turbulent est obtenu par un terme limitant la viscosité turbulente ANSYS_inc (2009).

$$\mu_t = \rho \left(\frac{\alpha k}{\max(\alpha \omega, S F_2)} \right) \quad (2.27)$$

Avec :

$$F_2 = \tanh \left[\left(\max \left(\frac{2\sqrt{k}}{\beta' \omega y}, \frac{500\mu}{y^2 \omega} \right) \right)^2 \right] \quad (2.28)$$

Où S = taux de déformation locale (strain rate)

y = distance du mur le plus rapproché.

2.5 Modèle de transport du tenseur de contraintes de Reynolds (DRSM)

Les modèles de turbulence présentés jusqu'à maintenant supposent que l'état local de la turbulence peut être caractérisé par des échelles de temps et de longueurs. De plus, les composantes du tenseur de contraintes de Reynolds peuvent être proportionnelles avec ces mêmes échelles. Dans le but de développer des modèles permettant une meilleure

représentation des diverses échelles de turbulence présentes dans un écoulement complexe, des équations de transport ont été développées pour décrire les composantes du tenseur de contraintes de Reynolds individuellement. L'avantage des modèles calculant le transport turbulent vient du fait qu'il est possible de se séparer de l'hypothèse de Boussinesq qui se base sur l'isotropie de l'écoulement. En utilisant la moyenne de Favre, tel que présenté en section 2.1, l'équation de transport des tensions de Reynolds pour un écoulement à densité variable se lit alors comme suit Jones (1994), Wouters (1998), Roekaerts (2002) :

$$\begin{aligned} \overline{\rho} \frac{D \widetilde{u_i'' u_j''}}{Dt} = & -\overline{\rho u_i'' u_k''} \frac{\partial \widetilde{U}_j}{\partial x_k} - \overline{\rho u_j'' u_k''} \frac{\partial \widetilde{U}_i}{\partial x_k} & (1a) \\ & - \left[\overline{u_i'' \frac{\partial p'}{\partial x_j}} + \overline{u_j'' \frac{\partial p'}{\partial x_i}} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \overline{u_k'' \frac{\partial p'}{\partial x_k}} \right] & (1b) \\ & - \overline{\rho} \varepsilon_{ij} & (1c) \\ & - \frac{\partial}{\partial x_k} \left[\overline{\rho u_i'' u_j'' u_k''} + \frac{2}{3} \delta_{ij} \overline{u_k'' p'} \right] & (1d) \\ & - \overline{u_i''} \frac{\partial \overline{p}}{\partial x_j} - \overline{u_j''} \frac{\partial \overline{p}}{\partial x_i} & (1e) \\ & + \frac{2}{3} \delta_{ij} \overline{p' \frac{\partial u_k''}{\partial x_k}} & (1f) \end{aligned} \quad (2.29)$$

Où (1a) = production de tensions de Reynolds (terme fermé ne nécessitant pas de modélisation)

(1b) = corrélation pression-déformation (terme ouvert nécessitant une modélisation)

(1c) = dissipation visqueuse (terme ouvert)

(1d) = flux diffusif turbulent (terme ouvert)

(1e) = gradient de pression moyen (terme fermé)

(1f) = fluctuation du tenseur déformation (terme fermé)

La dissipation visqueuse (1c) de (2.29) est modélisée selon l'hypothèse de Kolmogorov qui assume une isotropie locale des plus petites échelles de turbulence, endroit où la dissipation visqueuse est la plus significative. Le modèle de dissipation est alors défini comme :

$$\varepsilon_{ij} = \frac{2}{3} \varepsilon \delta_{ij} \quad (2.30)$$

Où le calcul de taux de dissipation d'énergie ε se calcule selon l'équation de transport suivante Hanjalic et Launder (1972) :

$$\bar{\rho} \frac{D\varepsilon}{Dt} = C_\varepsilon \frac{\partial}{\partial x_k} \left[\bar{\rho} \frac{\kappa}{\varepsilon} \overline{u_k u_l} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_l} \right] + C_{\varepsilon 1} \bar{\rho} \frac{\varepsilon}{\kappa} P_k - C_{\varepsilon 2} \bar{\rho} \frac{\varepsilon^2}{\kappa} \quad (2.31)$$

Avec la production d'énergie cinétique turbulente définie comme :

$$P_k = -\overline{u_i u_j} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} \quad (2.32)$$

Le flux diffusif turbulent (1d) de (2.30) est décrit à l'aide d'une approximation du gradient de transport Dally et Harlow (1970) :

$$\overline{u_i u_j u_k} = -C_s \frac{2}{3} \overline{u_k u_l} \frac{\partial \overline{u_i u_j}}{\partial x_l} \quad (2.33)$$

Où C_s est une constante empirique donnée au Tableau 2.1

Le corrélation pression-déformation (1b) est le terme clé pour lequel le plus de travaux de modélisation ont été effectués jusqu'à maintenant Li et al. (2003). Lors de sa modélisation, la corrélation est généralement représentée en deux parties (une lente et une rapide) avec les nomenclatures respectives suivantes : $\phi_{ij,1}$ et $\phi_{ij,2}$ (Hanjalic et Jakirlic (2002), Pope (2000)). Le terme $\phi_{ij,1}$ contient les fluctuations de vitesses et ramène la turbulence à un niveau quasi isotropique. Ce terme est généralement modélisé avec un tenseur de contrainte anisotropique (i.e. non-symétrique) et ses premiers et second invariants Yang et al. (2000). Le terme $\phi_{ij,2}$ est qualifié de rapide, car il est immédiatement influencé par un changement du gradient de vitesse moyenne. Il est souvent caractérisé pour son rôle «de retour à l'isotropie de la production d'énergie cinétique turbulente» Li et al. (2003). Cette partie de la corrélation pression-déformation est modélisée en fonction du taux de déformation moyen, de la vorticité moyenne et du tenseur de contrainte anisotropique.

2.5.1 Modèle LRR

Le modèle de base proposé par Rodi (1976) pour représenter la corrélation pression-déformation, est composée d'un terme de retour à l'isotropie ($\phi_{ij,1}$) et d'un terme d'isentropique de production ($\phi_{ij,2}$). Le terme (1b) de (2.29) est modélisé par la somme de ces deux termes :

$$\phi_{ij} = \phi_{ij,1} + \phi_{ij,2} \quad (2.34)$$

Avec

$$\phi_{ij,1} = -C_1 \bar{\rho} \varepsilon a_{ij} \quad (2.35)$$

$$\phi_{ij,2} = -C_2 \left(P_{ij} - \frac{1}{3} P_{kk} \delta_{ij} \right) \quad (2.36)$$

Où : a_{ij} (tenseur de contrainte anisotropique) :

$$a_{ij} = \frac{\overline{u_i u_j}}{k} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \quad (2.37)$$

P_{ij} (production d'énergie cinétique) :

$$P_{ij} = -\bar{\rho} \overline{u_i u_k} \frac{\partial \tilde{U}_j}{\partial x_k} - \bar{\rho} \overline{u_j u_k} \frac{\partial \tilde{U}_i}{\partial x_k} \quad (2.38)$$

2.5.2 Modèle SSG

Speziale et al. (1991) ont développé un modèle non linéaire quadratique pour la corrélation pression-déformation en se basant sur des considérations d'invariance ainsi que sur la théorie des systèmes dynamiques. Ce modèle fonctionne mieux que plusieurs autres dans des cas d'écoulement turbulent homogène, mais rencontre des problèmes dans les cas d'écoulement complexe Li et al. (2003). La corrélation pression-déformation est donc représentée ici par :

$$\phi_{ij,1} = -\bar{\rho}\epsilon \left[C_1 a_{ij} - C_{1s} \left(a_{ik} a_{kj} - \frac{1}{3} A_2 \delta_{ij} \right) \right] \quad (2.39)$$

$$\begin{aligned} \phi_{ij,2} = & -C_2 P_k \bar{\rho} a_{ij} + \left(C_3 + C_{3s} A_2^{1/2} \right) - \bar{\rho} k S_{ij} \\ & + C_4 \bar{\rho} k \left(a_{ik} S_{jk} + a_{jk} S_{ik} - \frac{2}{3} a_{kl} S_{kl} \delta_{ij} \right) \\ & + C_5 \bar{\rho} k \left(a_{ik} W_{jk} + a_{jk} W_{ik} \right) \end{aligned} \quad (2.40)$$

Où : C1 à C5 sont définies dans le Tableau 2.1.

Avec :

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \tilde{U}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{U}_j}{\partial x_i} \right) \quad (2.41)$$

$$W_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \tilde{U}_i}{\partial x_j} - \frac{\partial \tilde{U}_j}{\partial x_i} \right) \quad (2.42)$$

$$P_k = -\widetilde{u_i u_j} \frac{\partial \tilde{U}_i}{\partial x_j} \quad (2.43)$$

Tableau 2.1 Sommaire des constantes pour les modèles LRR-IP et SSG.

Tiré de (Li 2003, p.217)

	C ₁	C _{1s}	C ₂	C ₃	C _{3s}	C ₄	C ₅	C _ε	C _{ε1}	C _{ε2}	C _s
LRR-IP	1.8	-	0.6	-	-	-	-	0.18	1.44	1.92	0.22
SSG	1.7	1.05	0.9	0.8	-0.65	0.625	0.2	0.18	1.44	1.83	0.22

2.6 Modèles algébriques du tenseur de contraintes de Reynolds.

Tel qu'il a été présenté dans la section précédente, les modèles de turbulence utilisant des équations supplémentaires pour décrire le transport du tenseur de contraintes de Reynolds sont une alternative intéressante afin de mieux décrire les écoulements complexes et se libérer de la limitation d'isotropie engendrée par l'hypothèse de Boussinesq. Comme, les modèles de deuxième ordre rencontrent aussi des difficultés d'ordre numérique dans la résolution de l'équation de transport du tenseur de contraintes de Reynolds, plusieurs

recherches ont été effectuées afin de trouver des approximations algébriques au tenseur anisotropique présenté en (2.37). L'approche classique algébrique de modélisation du tenseur de contraintes de Reynolds (ARSM) a été développé par Rodi (1972). Afin d'introduire les modèles ARSM et EARSM, Wallin et Johansson (2000) présentent l'équation du transport du tenseur des contraintes anisotropiques de Reynolds dans un système de coordonnées cartésiennes rotationnelles :

$$K \frac{Da_{ij}}{Dt} - \left(\frac{\partial T_{ijl}}{\partial x_l} - \overline{u_i u_j} \frac{\partial T_l^{(\kappa)}}{\partial x_l} \right) = - \frac{\overline{u_i u_j}}{K} (P - \varepsilon) + P_{ij} - \varepsilon_{ij} + \phi_{ij} \quad (2.44)$$

Où : $-T_{ijl}$ = flux turbulent du tenseur de contraintes de Reynolds

$-T_l^{(\kappa)}$ = flux moléculaire de l'énergie cinétique turbulente

ε_{ij} = tenseur de dissipation visqueuse

K = énergie cinétique

N.b. : La production d'énergie cinétique n'a pas à être modélisée, car elle est exprimée explicitement dans le tenseur des contraintes de Reynolds.

2.6.1 Modèle ARSM

L'approche ARSM consiste essentiellement à négliger le terme de contrainte anisotropique a_{ij} dans l'équation de transport du tenseur de contraintes de Reynolds. L'équation simplifiée devient alors Wallin et Johansson (2000):

$$\frac{\overline{u_i u_j}}{\kappa} (P - \varepsilon) = P_{ij} - \varepsilon_{ij} + \phi_{ij} + a_{ik} \Omega_{kj}^S - \Omega_{ik}^S a_{kj} \quad (2.45)$$

Avec :

$$\Omega_{ij}^S = \tau \varepsilon_{jik} \omega_k^S \quad (2.46)$$

Où : ω_k^S = vecteur du taux de rotation angulaire du système

Comme il peut être observé en (2.44) la méthode traditionnelle ARSM n'est pas facile à résoudre, car il s'agit d'une équation implicite. En effet, comme le tenseur de contrainte anisotropique se retrouve des deux côtés de l'équation, il devient difficile numériquement de résoudre cette équation. Dans plusieurs applications, le coût de calcul devient si élevé que le bénéfice d'utiliser le modèle ARSM au lieu des modèles traditionnels de deuxième ordre est perdu Rodi (1976).

2.6.2 Modèle EARSM

Pour combler cette lacune, Wallin et Johansson (2000) propose un modèle explicite permettant d'exprimer le tenseur de contrainte a_{ij} (2.47). Pour les écoulements bi-dimensionnel, la formulation proposée par les auteurs présente une solution exacte de la méthode implicite ARSM. Pour les écoulements 3D, Wallin et Johansson (2000) affirme que la formulation EARSM permet de mieux capturer les effets des écoulements complexes comme ceux incluant des tourbillons longitudinaux rotatifs (swirl).

$$\begin{aligned}
 a_{ij} = & \beta_1 S_{ij} + \beta_3 \left(\Omega_{ik} \Omega_{kj} - \frac{1}{3} \Omega_{kl} \Omega_{lk} \delta_{ij} \right) + \beta_4 \left(S_{ik} \Omega_{kj} - \Omega_{ik} S_{kj} \right) + \\
 & \beta_6 \left(S_{ik} \Omega_{kl} \Omega_{lj} + \Omega_{ik} \Omega_{kl} S_{lj} - \frac{2}{3} S_{kl} \Omega_{lm} \Omega_{mk} \delta_{ij} \right) + \\
 & \beta_9 \left(\Omega_{ik} S_{kl} \Omega_{lm} \Omega_{mj} + \Omega_{ik} \Omega_{kl} S_{lm} \Omega_{mj} \right)
 \end{aligned} \tag{2.47}$$

Avec :

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \tau_{ij} \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) \tag{2.48}$$

$$\Omega_{ij} = \frac{1}{2} \tau_{ij} \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} - \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) \tag{2.49}$$

Où : S_{ij} = tenseurs de déformations non-dimensionnel

Ω_{ij} = taux de rotation non-dimensionnel

Plus de détails concernant le calcul des coefficients β peuvent être trouvés dans ANSYS_inc (2009).

Maintenant que les modèles de turbulence utilisés dans ce mémoire sont présentés, la deuxième partie de cette revue bibliographique se concentrera sur les modèles utilisés pour simuler l'écoulement réactif. Dans ce cas particulier de brûleur, l'oxydant et le combustible sont introduits séparément et mélangés grâce à la turbulence. Ce type de combustion est appelé combustion turbulente non prémélangée.

2.7 Combustion turbulente non prémélangée

Dans plusieurs applications industrielles (fournaise industrielle, turbine à gaz aéronautique/industrielle, moteur diesel, etc.), le combustible et l'oxydant arrivent dans la chambre à combustion de manière séparée. Afin de faciliter le contrôle ou la sécurité, le carburant et le comburant se mélangent (diffusent) l'un dans l'autre avant de s'enflammer. Ce processus est appelé combustion non prémélangée (CNP). La CNP est caractérisée par la diffusion du carburant et de l'oxydant, car c'est ce phénomène qui contrôle le taux de réaction.

Lorsque l'on compare les échelles de temps, le temps physique du processus de mélange diffusif est beaucoup plus grand que celui du temps de réaction chimique. Il est donc réaliste d'affirmer que cette combustion est caractérisée par une chimie infiniment rapide. Cette hypothèse permet alors de simplifier le processus chimique en permettant d'éliminer les paramètres associés avec les mécanismes de réactions conventionnels. Dans certaines situations, il arrive par contre que les échelles de temps de turbulence (dictant le mélange) et de réaction chimique deviennent semblables localement. Dans ces cas, l'hypothèse de chimie infiniment rapide ne tient plus et des effets d'instabilité (trempe et extinctions locales) doivent être pris en compte Borghi et Champion (2000).

2.7.1 Modélisation RANS de la combustion turbulente non prémélangée

Cette section de la revue bibliographique présente l'approche qui est utilisée pour modéliser l'écoulement réactif non prémélangé à l'aide des équations moyennées de RANS. Afin de pouvoir utiliser ces équations, certaines hypothèses doivent être assumées Poinso et Veynante (2005):

1. la chaleur spécifique (C_p) de chaque espèce est égale et constante;
2. la diffusion moléculaire (D_k) suit la loi de Fick et est égale pour chaque espèce;
3. le nombre de Lewis (diffusion thermique/diffusion moléculaire) est unitaire;
4. le combustible et l'oxydant sont introduits séparément dans le domaine et avec leur température et concentration respectives;

En se servant du moyennage de Favre, les équations modélisant la mécanique des fluides réactifs se présentent alors comme suit Poinso et Veynante (2005):

Équation de conservation de la masse

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i) = 0 \quad (2.50)$$

Équation de conservation de la quantité de mouvement

$$\frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{u}_i)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j) + \frac{\partial \bar{\rho}}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\tilde{\tau}_{ij} - \bar{\rho} \widetilde{u_i u_j} \right) \quad (2.51)$$

Équation de conservation des espèces chimiques

$$\frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{Y}_k)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{Y}_k) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\overline{\rho D_K \frac{\partial Y_k}{\partial x_i}} - \bar{\rho} \widetilde{u_i Y_k} \right) + \bar{\omega}_k \quad (2.52)$$

Équation de conservation de la fraction de mélange z

$$\frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{z})}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{z}) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\overline{\rho D \frac{dz}{dx_i}} - \bar{\rho} \widetilde{u_i z} \right) \quad (2.53)$$

Équation de conservation de la variance de z

$$\frac{\partial(\bar{\rho} \widetilde{z''^2})}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\bar{\rho} \widetilde{u_i z''^2}) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\bar{\rho} \frac{\lambda}{C_p} \frac{d \widetilde{z''^2}}{dx_i} \right) + 2 \bar{\rho} \frac{\lambda}{C_p} \left(\frac{\partial \widetilde{z}}{\partial x_i} \right)^2 - \bar{\rho} \widetilde{\chi} \quad (2.54)$$

Avec : z = fraction de mélange

$\widetilde{z''^2}$ = variance de z selon le moyennage de Favre

C_p = chaleur spécifique à pression constante

λ = coefficient de diffusivité thermique

Où le tenseur de contraintes de Reynolds est représenté en utilisant des modèles classiques de turbulence présentés précédemment. Le transport scalaire turbulent $\widetilde{u_i Y_k''}$ est modélisé utilisant l'hypothèse de gradient suivant :

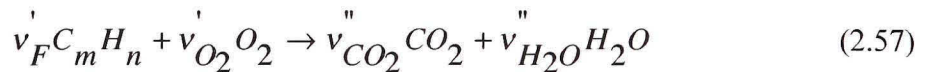
$$\bar{\rho} \widetilde{u_i Y_k''} = - \frac{\lambda}{C_p} \frac{\partial \widetilde{Y_k}}{\partial x_i} \quad (2.55)$$

Le taux de dissipation du scalaire passif, $\widetilde{\chi}$ est défini selon:

$$\widetilde{\chi} = c \frac{\varepsilon}{\kappa} \widetilde{z''^2} \quad (2.56)$$

2.7.2 Stœchiométrie

Il est important d'introduire un concept fondamental en combustion : la stœchiométrie (st). La stœchiométrie représente un état idéal de transformation chimique dans lequel tout le carburant est transformé en produit de combustion. L'équation (2.57) présente l'équation chimique générique pour la combustion d'un combustible d'hydrocarbure dans l'oxygène pur.



Où : $v'_F, v'_{O_2}, v''_{CO_2}, v''_{H_2O}$ = Coefficients stœchiométriques de l'équation chimique balancée.

Le coefficient stœchiométrique de combustion en oxygène pur peut maintenant être défini comme :

$$s_{o_2} = \frac{v_{O_2}' W_{O_2}}{v_F' W_F} \quad (2.58)$$

Où : W_X = poids moléculaire de chaque espèce

Comme dans la majeure partie des applications pratiques la combustion n'est pas effectuée dans l'oxygène pur mais plutôt dans l'air, s doit être modifié en tenant compte des autres composantes non réactives de l'air. Ainsi comme l'air n'est composé qu'à 23.2% de fraction massique d' O_2 , le reste étant de l'azote n'entrant pas en réaction, s dans l'air devient

$$s_{air} = s_{o_2} / 0.232 \quad (2.59)$$

2.7.3 Scalaire passif et l'élément de flammelette

Burke et Schumann (1928) ont été des pionniers de la combustion non prémélangée. Ils ont introduit à cette époque un scalaire appelé fraction de mélange Z , indépendant du processus de combustion. Ce scalaire est qualifié de passif car il n'intervient pas dans les réactions chimiques. Sa valeur varie uniquement dû aux phénomènes de diffusion et de convection présents dans l'écoulement. Le scalaire Z peut être défini comme Poinot et Veynante (2005):

$$Z = \frac{sY_F - Y_O + Y_O^0}{sY_F^0 + Y_O^0} \quad (2.60)$$

avec Y_F & Y_O = fraction massique de combustible et d'oxydant

Y_X^0 = fraction massique de combustible et d'oxydant dans leur jet respectif, dans le cas où ils ne sont pas purs.

$Y_O^0 = 0.232$ (fraction massique de l'oxygène dans l'air).

Les fractions massiques de chacun des éléments k de (2.52) peuvent être calculées à l'aide de l'équation de conservation suivante :

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i Y_k) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_i} \right) + \dot{\omega}_k \quad (2.61)$$

Où : D_k = Coefficient de diffusion moléculaire de l'espèce k déterminé selon la loi de Fick

$\dot{\omega}_k$ = Taux de production de l'espèce k.

Le scalaire passif offre l'avantage d'exprimer (2.61) en fonction de cette nouvelle variable. Afin de mieux comprendre ce changement de variable proposé par Williams (1985) et Peters (2000), la Figure 2.2 montre un élément de flamme de diffusion. Ce changement de variable consiste à changer le système de coordonnées (x_1, x_2, x_3, t) physiques à celui de $Z = f(y_2, y_3, t)$. Comme les gradients de Z dans les directions y_2 et y_3 sont négligeables comparativement au plan normal Poinsot et Veynante (2005), la structure de l'élément de flamme devient alors unidimensionnelle. Les directions y_2 et y_3 pourraient ici être interprétées physiquement comme la déformation (ou courbure) de l'élément de flamme suivant deux directions perpendiculaires du même plan.

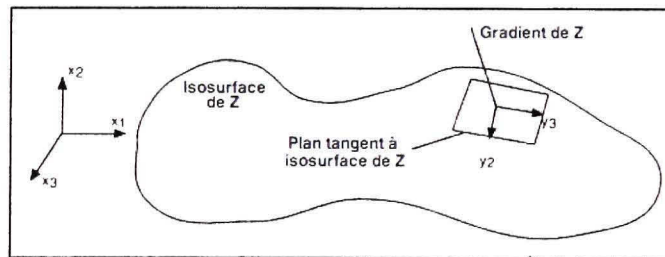


Figure 2.2 Changement de variable pour un élément de flamme de diffusion.
Adaptée de Poinsot (2005, p. 87)

Comme beaucoup d'applications réelles de combustion sont constituées de champs réactifs multidimensionnels et turbulents, certaines hypothèses doivent être respectées afin de pouvoir utiliser cet élément de flamme dans un champ turbulent. En effet, en terme d'analyse dimensionnelle comparative, cet élément doit être considéré comme très inférieur aux échelles de turbulence et de déformation présente dans l'écoulement. Tel qu'illustré sur la Figure 2.3, lorsque ces critères sont respectés, les flammes turbulentes peuvent alors être modélisées comme un ensemble de petites flammes laminaires (flammelette), embouties dans

le champ turbulent. Y_F^0 , T_F^0 , Y_O^0 , T_O^0 , correspondent respectivement aux températures et fractions massiques de carburant et d'oxydant avant qu'ils se mélangent.

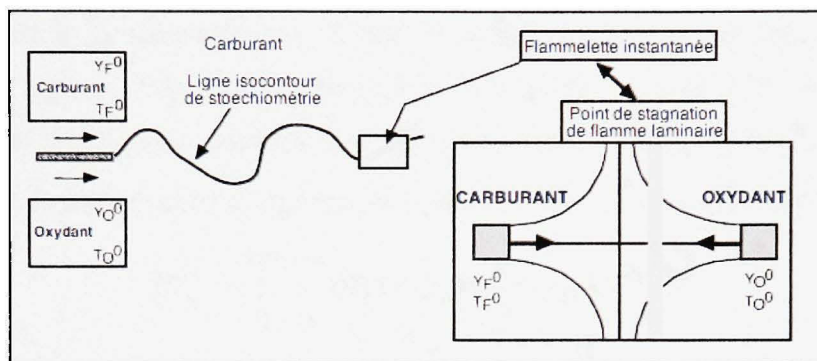


Figure 2.3 Concept d'élément de flammelette emboutie dans un champ turbulent.
Adaptée de Poinsot (2005, p. 323)

Avec ce changement de variable de l'espace physique à l'espace de Z , il est maintenant possible de décrire les températures et la fraction massique selon :

$$T = f(Z, t) \quad (2.62)$$

$$Y_k = f(Z, t) \quad (2.63)$$

En appliquant le changement de variable de Z à (2.61), l'équation de conservation devient alors :

$$\rho \frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} = \dot{\omega}_k + \rho D \left(\frac{\partial Z}{\partial x_i} \frac{\partial Z}{\partial x_i} \right) \frac{\partial^2 Y_k}{\partial z^2} = \dot{\omega}_k + \frac{1}{2} \rho \chi \frac{\partial^2 Y_k}{\partial z^2} \quad (2.64)$$

Où : W_x = poids moléculaire de chaque espèce

χ = taux de dissipation du scalaire passif

2.7.4 Calcul du terme source

Lors de la simulation de combustion, l'élément qui représente le plus gros défi à modéliser est le terme source chimique $\overline{\dot{\omega}_k}$. Dans plusieurs cas réactifs, la température est calculée selon Poinsot et Veynante (2005) :

$$\rho \frac{\partial T}{\partial t} = \dot{\omega}_k + \frac{1}{2} \rho \chi \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \quad (2.65)$$

Lorsque le modèle de flammelette est utilisé, le terme source n'est pas calculé directement pour chaque espèce. Des outils statistiques sont plutôt utilisés afin de calculer les températures et les fractions massique des espèces en fonction de $\tilde{\chi}$. Ainsi, les équations de température et de conservation d'espèces deviennent Poinso et Veynante (2005) :

$$\bar{\rho} \tilde{Y}_k = \int_0^{+\infty} \int_0^{+\infty} \rho Y_k(Z, \chi_{st}) p(Z, \chi_{st}) dZ d\chi_{st} \quad (2.66)$$

$$\bar{\rho} \tilde{T} = \int_0^{+\infty} \int_0^{+\infty} \rho T(Z, \chi_{st}) p(Z, \chi_{st}) dZ d\chi_{st} \quad (2.67)$$

Où $p(Z, \chi_{st})$ = probabilité conjointe des deux variables.

En assumant l'indépendance statistique des deux variables et en utilisant la moyenne pondérée de Favre, il est alors possible de séparer cette fonction selon.

$$\rho p(Z, \chi_{st}) = \bar{\rho} \tilde{p}(Z) p(\chi_{st}) \quad (2.68)$$

Les fonctions de densité de probabilités (PDF) sont alors utilisées afin d'évaluer les probabilités statistiques des deux variables. La PDF de Z est la plupart du temps calculé selon une fonction β Poinso et Veynante (2005):

$$\tilde{p}(Z) = (\beta(a, b))^{-1} (1-Z)^{b-1} \quad (2.69)$$

Avec :

$$\beta(a, b) = \int_0^1 Z^{a-1} (1-Z)^{b-1} \quad (2.70)$$

Où :

$$a = \tilde{Z} \left[\frac{\tilde{Z}(1-\tilde{Z})}{z''} - 1 \right] \quad (2.71)$$

$$b = \frac{a}{\tilde{Z}} - a \quad (2.72)$$

Pour la PDF de le taux de dissipation du scalaire passif stochiométrique $\tilde{\chi}_{st}$ Effelsberg et Peters (1988) ont proposé une distribution logarithmique –normale :

$$p(\tilde{\chi}_{st}) = \frac{1}{\chi_{st} \sigma \sqrt{2\pi}} \exp\left(\frac{(\ln \tilde{\chi}_{st} - \nu)}{2\sigma^2}\right) \quad (2.73)$$

Où : ν est relié à la valeur moyenne de $\tilde{\chi}_{st}$ selon :

$$\tilde{\chi}_{st} = \exp\left(\nu + \frac{\sigma^2}{2}\right) \quad (2.74)$$

À son tour, $\tilde{\chi}$ est relié à $\tilde{\chi}_{st}$ selon la théorie des flammes laminaires déformées de masse volumique constante :

$$\tilde{\chi} = \tilde{\chi}_{st} \int_0^1 \frac{F(Z)}{F(Z_{st})} \tilde{p}(Z) dZ \quad (2.75)$$

Où :

$$F(Z) = \exp\left(-2\left[\operatorname{erf}^{-1}(2Z-1)\right]^2\right) \quad (2.76)$$

Avec erf = fonction d'erreur générée lors de l'intégration de la distribution normale Poinsot et Veynante (2005).

2.7.5 Construction de la bibliothèque de flamme

Lors de simulations, les équations (2.66) et (2.67) sont résolues séparément du reste du code de mécanique des fluides. Les fonctions PDF sont la plupart du temps résolues de manière externe et les concentrations des espèces ainsi que les températures sont tabulées dans une bibliothèque de flamme externe. Dans le cadre de ce mémoire, le logiciel commercial CFX-RIF a été utilisé pour générer la bibliothèque de flamme. Le concept de ce logiciel est basé sur une transformation de variable qui utilise la fraction de mélange comme coordonnée indépendante. Il est alors possible de transformer les équations balancées du mécanisme chimique (qui utilise les fractions massiques et enthalpie de formation) en fonction de Z et résoudre la structure de flamme dans un calcul unidimensionnel.

Les équations qui régissent la construction de cette bibliothèque de flamme ont été présentées dans la section précédente, mais elles sont détaillées plus explicitement ici selon Peters (1984) :

$$\rho \frac{\partial T}{\partial t} - \frac{1}{c_p} \frac{\partial p}{\partial t} - \rho \frac{\chi}{2} \frac{\partial^2 T}{\partial Z^2} - \rho \frac{\chi}{2c_p} \frac{\partial T}{\partial Z} \frac{\partial c_p}{\partial Z} - \sum_i \frac{N}{i} \rho \frac{\chi}{2Le_i} \frac{c_{pi}}{c_p} \frac{\partial Y_i}{\partial Z} \frac{\partial T}{\partial Z} + \frac{1}{c_p} \sum_i \frac{N}{i} \dot{m}_i h_i - \frac{\dot{q}_R}{c_p} = \frac{\dot{h}_{chem}}{c_p} \quad (2.77)$$

$$\rho \frac{\partial Y_i}{\partial t} - \rho \frac{\chi}{2Le_i} \frac{\partial^2 Y_i}{\partial Z^2} = \dot{m}_i \quad (2.78)$$

Où : N = nombre d'espèces chimiques

\dot{m}_i = taux de production chimique de l'espèce i

h_i = enthalpie spécifique de l'espèce i

\dot{q}_r = pertes de chaleur par radiation

Le_i = nombre de Lewis de l'espèce i défini ici comme :

$$Le_i = \frac{\lambda}{\rho C_p D_i} \quad (2.79)$$

Selon Peters (1984), les termes de convection de (2.77) et (2.78) peuvent être négligés car tous les scalaires considérés sont transportés avec la même vitesse dans la dimension physique. Il n'existe alors pas de vitesse de convection relative entre Z et les autres scalaires comme la température et les fractions massique d'espèces. Plus de détails sur la composition de la bibliothèque de flamme seront exposés dans le chapitre suivant.

2.7.6 Résolution RANS de l'écoulement turbulent réactif dans CFX

L'approche classique utilisée par plusieurs codes pour simuler un écoulement réactif turbulent à l'aide du modèle de combustion de flammelettes est résumée à la Figure 2.4. Dans un premier temps, le code numérique résout (2.50) à (2.54). Les seules variables qui couplent la mécanique des fluides avec la combustion sont k et ϵ utilisées dans la modélisation de χ . Lors de l'utilisation du modèle de flammelettes pour simuler un

écoulement réactif, les équations de conservation (2.53) (2.54) sont résolues afin d'établir les fractions de mélange ainsi que leurs variations respectives. L'équation de conservation d'espèces (2.52) n'est pas résolue directement, et les concentrations sont établies de manière découplée en utilisant la bibliothèque de flamme. Lors de l'utilisation du modèle flammelette avec CFX, la température est résolue selon ANSYS_inc (2009):

$$\rho \frac{\partial T}{\partial t} - \frac{\chi_{st}}{2} \frac{\partial^2 T}{\partial Z^2} = \frac{1}{\rho C_p} \sum_{i=1}^n h_i \dot{m}_i + \frac{\dot{q}_r}{C_p} + \frac{1}{C_p} \frac{\partial P}{\partial t} \quad (2.80)$$

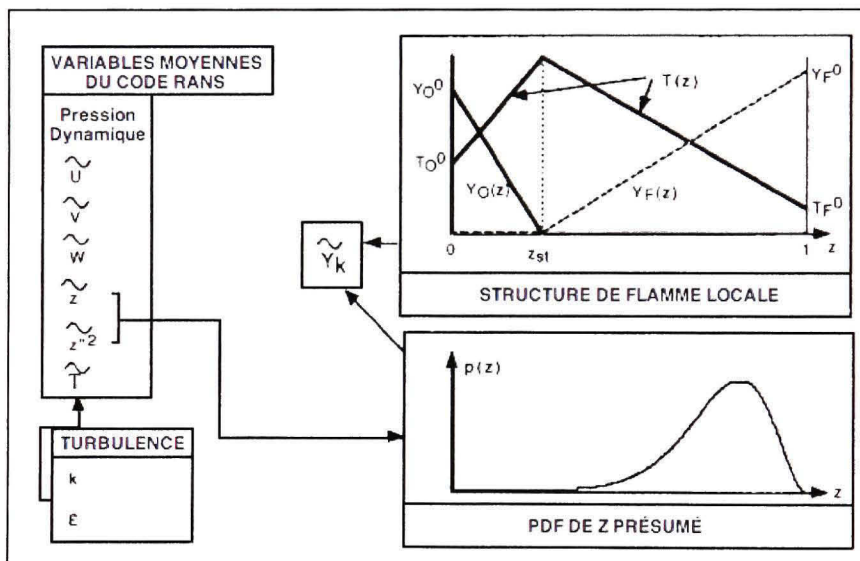


Figure 2.4 Méthode de résolution d'un écoulement réactif à l'aide du modèle de combustion flammelette employé dans CFX.
Adaptée de Poinsot (2005, p. 323)

Le couplage de l'énergie absorbée ou émise à la dynamique de l'écoulement est fait au travers de la masse volumique, qui est utilisée dans l'équation de conservation de quantité de mouvement. La méthode numérique utilisée pour modéliser l'écoulement du brûleur est celle des volumes finis ANSYS_inc (2009). Les termes advectifs des équations 2.9 à 2.12 $\bar{\rho}\tilde{u}_i, \bar{\rho}\tilde{u}_i\tilde{u}_j, \bar{\rho}\tilde{u}_i\tilde{Y}_k, \bar{\rho}\tilde{u}_i\tilde{h}_s$, sont modélisés à l'aide d'une méthode numérique de deuxième ordre présenté par Barth et Jespersion (1989).

CHAPITRE 3

MAILLAGE ET CONDITIONS AUX LIMITES

Cette section du mémoire présente les détails du montage expérimental de Dally et al. (1998a). Dû à l'incompatibilité interne de CFX quant à l'utilisation de certaines conditions aux limites entre les modèles de 2-équations et de DRSM, deux types de maillages seront présentés ici. Les conditions aux limites seront également examinées plus en détail afin de voir leurs conséquences physiques, mathématiques et numériques sur la solution.

3.1 Maillage des modèles de deux équations

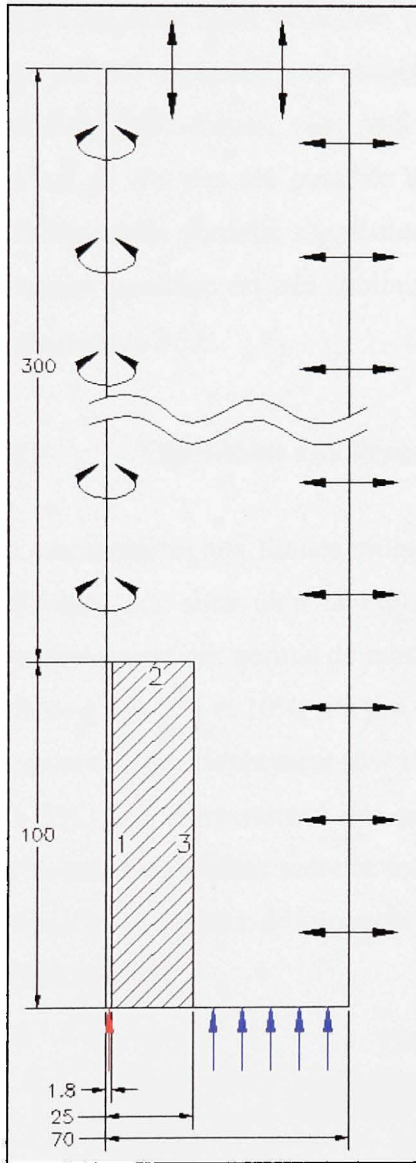
Tel qu'il a été mentionné dans le premier chapitre, les conditions aux frontières à l'entrée du brûleur sont très importantes afin de fournir les meilleures prédictions possibles de l'écoulement. Dans le but de diminuer les approximations encourues par l'introduction de profils de vitesse aux entrées du brûleur (jet central et écoulement annulaire), des sections de développement pour les écoulements annulaires et du jet ont été ajoutées au domaine de calcul, tel qu'illustré sur la Figure 3.1. Pour calculer la longueur nécessaire afin d'obtenir l'écoulement totalement développé dans un tuyau, l'équation 3.1 a été utilisée (White (2003)) :

$$L_D = 4.4 \text{Re}^{1/6} D_H \quad (3.1)$$

Les détails concernant le calcul nombre de Reynolds (Re) et le diamètre hydraulique de la section concernée (D_H) sont définis dans White (2003).

Selon le nombre de Reynolds du jet de carburant central ($\approx 16\,000$), la longueur du canal minimale pour assurer un profil pleinement développé devrait être de 80 mm pour le cas réactif (le plus rapide). Ce dernier a été arrondi ici à 100 mm, soit de $2D_B$. Dans le cas de l'écoulement annulaire, comme ce dernier ne peut pas être considéré comme pleinement développé selon les dimensions expérimentales, cette longueur a été fixée arbitrairement à $2D_B$ pour l'écoulement à froid. L'influence de ce canal latéral sera étudiée aux chapitre 5.

Dans le but de bien décrire les petites échelles de turbulence qui sont présentes dans le canal de développement du jet central, une attention spéciale a été apportée au raffinement du maillage dans le canal d'entrée.



Au niveau de la zone du brûleur, où se situent les zones de recirculation, le maillage a également été raffiné dans la direction radiale et axiale en appliquant une distribution de noeuds exponentielle afin de bien couvrir les zones de cisaillement présentées par Dally et al. (1998a). CFX est un code de mécanique des fluides exclusivement tri-dimensionnel et il n'est pas possible de simuler des cas axi-symétrique bi-dimensionnel. Ainsi, dans l'objectif de diminuer les coûts de calcul, seule une section en pointe de tarte de 15° du domaine cylindrique à été modélisée.

La Figure 3.1 présente une vue d'élévation d'une section cylindrique partielle du domaine. Comme la zone d'intérêt du brûleur se situe radialement près du corps central du brûleur (injecteur central), le rayon de la zone de l'écoulement annulaire a été établi selon les dimensions établies originalement par Dally et al. (1998a).

Figure 3.1 Maillage et conditions aux limites pour des modèles de 2-Éq. et DRSM.




3.2 Maillage des modèles DRSM

L'utilisation d'un domaine partiel de 15°, impose l'utilisation de conditions de périodicité entre les deux faces verticales principales du maillage. Comme cette condition impose que les valeurs vectorielles et scalaires de chaque nœud soient les mêmes de part et d'autre des surfaces périodiques, cela peut apporter de l'instabilité numérique (ANSYS_inc (2009)). Ainsi, il n'a pas été possible de converger les modèles DRSM (possédant une équation différentielle partielle supplémentaire) et un second type de maillage a du être construit. Ce dernier maillage est très similaire à celui de la Figure 3.1 mais est constitué d'un domaine complet de 360°.

3.3 Conditions aux limites

Les conditions aux limites utilisées pour simuler les cas inertes et réactifs sont présentées au Tableau 3.1 ainsi qu'à la Figure 3.1 En ce qui concerne la turbulence, des simulations préliminaires ont permis de montrer que l'influence de l'intensité turbulente, respectivement fixée à 2%, 5% et 10%, n'a pas d'influence significative sur le champ de vitesse, lorsque des canaux de développement sont utilisés. Ainsi, l'intensité turbulente a été établie arbitrairement à 5%. Les températures des parois 1, 3 et 2 sont respectivement de 300K et 953K et l'échange de chaleur entre le corps central et l'écoulement est calculé selon le coefficient de transfert de chaleur de la couche de céramique utilisée pour protéger la surface 2 (Dally et al. (1998a)).

Tableau 3.1 Conditions aux limites

Symboles	Conditions aux Frontières	Valeurs
	Périodicité	N/A
1, 3 et 2	Parois	Non glissement, T = 300 et 953K
	Entrée	$V_j = 61\text{ m/s}$ et $V_{co} = 20\text{ m/s}$ (inerte) $V_j = 118\text{ m/s}$ et $V_{co} = 40\text{ m/s}$ (réactif) T = 300K
	Ouverture, ANSYS_inc (2009)	$\frac{\partial P}{\partial x_i} = 0$ $\frac{\partial U}{\partial x_i} = 0$ T = 300K

Les deux plans verticaux délimitant le 15° de la pointe de tarte du domaine sont considérés comme des surfaces périodiques. En d'autres mots, les quantités scalaires et vectorielles des nœuds correspondants (entre chacune des surfaces) sont imposées à avoir des valeurs égales. La surface cylindrique latérale, ainsi que la surface de sortie du domaine de calcul correspondent aux frontières avec l'atmosphère. Dans CFX, cette condition frontière est nommée ouverture et permet au fluide de traverser la frontière du domaine de calcul dans les deux directions. Mathématiquement, cela signifie que le gradient de vitesse et de pression normal est nul. Pour ce cas particulier, comme l'expérimentation se fait à la pression atmosphérique et dans un laboratoire fermé, l'hypothèse de gradients de pression et de vitesses nuls (i.e. pression relative et gradient de turbulence = 0) est utilisé afin de pouvoir utiliser la condition frontière d'ouverture. La condition aux limites de transfert de chaleur avec les parois extérieures a été établie après quelques tentatives numériques. En effet, après avoir fait varier la température de la paroi extérieure du domaine, il a été observé que ce paramètre semble avoir peu d'effet sur la température de la flamme dans la zone de recirculation. Suite à cette conjecture, les parois ont été fixées arbitrairement à 300K même si la distance à partir de l'axe central est relativement faible.

3.4 Étude de Maillage

Une étude de maillage classique est traditionnellement bâtie autour de trois maillages, afin de montrer l'influence du maillage sur la solution numérique. Ainsi dans ce mémoire, trois types de maillage (grossier, moyen et fin) seront présentés. Les écoulements réactifs demandent des maillages plus fin dû aux plus petites échelles caractéristiques engendrées par la combustion et une étude de maille aurait du être faite sur les cas de combustion. Toutefois, comme les discrétisations des domaines de calcul présentées ici sont basées sur des maillages de cas réactifs référentiels, (Dally et al. (1998a) et Li et al. (2003)), l'étude de maillages n'a été effectuée que sur les cas inertes.

Afin d'estimer de manière quantitative l'erreur engendrée par la discrétisation du maillage, Celik et al. (2008) présente une technique basée sur la grosseur des éléments de maille ainsi

que sur la variation d'un paramètre significatif à la recherche en cours. Les fondements de cette méthodologie très appliquée ont été d'abord introduit par Richardson (1911). Cette méthodologie appelée l'indice GCI sera présentée à la section 3.4.3.

3.4.1 Présentation des maillages de l'étude de maillage

La discrétisation du domaine de calcul a été établie à partir de suggestions et maillages de références de certains auteurs détaillés dans le Tableau 3.2. La quantité de nœuds distribués radialement dans le canal du jet a été augmentée afin d'avoir une résolution de l'écoulement plus précise quant aux profils de vitesse entrant dans le domaine effectif de combustion. La région radiale délimitant la face du brûleur (rayon de 25mm) a également été raffinée afin de voir l'influence du maillage sur la zone de recirculation du brûleur.

Les Tableaux 3.3 et 3.4 présentent les différents maillages pour les modèles de deux équations ainsi que ceux du deuxième ordre. Selon la direction radiale de la Figure 3.1 se trouve le nombre de nœuds pour le canal du jet, la face du brûleur et la région annulaire. Dans la direction longitudinale, ils sont définis selon le nombre de nœuds dans le canal de jet, dans le canal de l'écoulement annulaire ainsi que dans le domaine effectif où s'effectue la combustion proprement dite. Finalement, la dernière colonne présente le nombre de nœuds dans la direction circonférentielle. Comme le champ de vitesse est orienté fortement dans la direction axiale et qu'il faut surtout prendre en compte les gradients importants, le choix du maillage sera fait en tenant compte des performances de prédictions des vitesses moyennes et de leurs variations respectives dans cette même direction (u). L'étude de sensibilité de maillage est effectuée en simulant l'écoulement inerte air-air défini au chapitre 2. Dû aux ressources de calcul limitées ainsi qu'à l'utilisation d'un domaine complet de 360° , la résolution des maillages des modèles de 2- eq n'a pu être conservée pour les maillages des modèles DRSM. Ainsi, afin de mesurer l'influence de cet aspect, deux mailles avec des résolutions angulaires de 10° et 6° seront étudiées. Les modèles de turbulence choisis pour cette étude sont : k-epsilon classique et LRR, utilisé en autre par Li et al. (2003).

Tableau 3.2 Discrétisation numérique du montage de Dally et al. (1998a)
selon quelques auteurs de la littérature

Auteurs	Modèles (turbulence et combustion)	Longueur du canal d'entrée (mm) amont du brûleur	Dimensions* (mm) radiales et longitudinales	Quantité de nœuds radiaux et longitudinaux
Dally, 1998	k-epsilon/EDM	100	70 x 300	60 x 100
Hossain 2001 Hossain 2003 Hossain 2005	k-epsilon/ Flammelette	Non	170 x 216	90 x 100
Li 2003	DRSM/EDM	Non	150 x 300	129 x 161
Yan 2004	EARSM/ Flammelette	50	300 x 1000	Total : 18000
Ravikanti 2009	DRSM/ Flammelette	150	40 x 215	111 x 162

* Les dimensions sont considérées à partir de la face du brûleur.

Tableau 3.3 Discrétisation numérique des modèles à deux équations

# Nœuds	N_{r_jet}	N_{r_fb}	N_{r_ann}	N_{a_jet}	N_{a_ann}	N_{a_dom}	N_{circonf}
230 E03	25	175	40	160	45	150	5
361 E03	25	375	45	160	45	155	5
497 E03	25	175	101	200	160	250	5

Tableau 3.4 Discrétisation numérique des modèles de deuxième ordre

# Nœuds	N_{r_jet}	N_{r_fb}	N_{r_ann}	N_{a_jet}	N_{a_ann}	N_{a_dom}	N_{circonf}	Rés. angulaire
986 E03	5	30	20	300	70	250	65	6°
1.586 E06	25	201	55	160	45	156	36	10°
1.721 E06	10	50	30	300	70	250	65	6°

3.4.2 Analyse de maille

Comme il est possible de le voir sur la Figure 3.2, les prédictions des trois raffinements des modèles de 2 équations sont très similaires pour les trois stations présentées ici. Les courbes de U et u' des Figures 3.1 et 3.2 sont présentées à diverses stations de mesures situées à des distances axiales de 10, 20, 40, 70 et 120 mm de la paroi 2 tel qu'illustrée à la Figure 3.1. La seule différence mineure se situe près de la région radiale se rapprochant de la paroi interne de l'écoulement annulaire où les maillages de 230 000 et 361 000 nœuds fournissent une mince amélioration de u' . La ressemblance entre les prédictions de ces maillages peut être due à la faible différence de nœuds entre les trois modèles. Afin de répondre aux exigences de raffinement demandées par les cas réactifs, le maillage intermédiaire, possédant plus de nœuds dans la région du corps central, sera utilisé pour l'étude des modèles de turbulence à deux équations.

Les résultats de l'étude de maille des modèles DRSM de la Figure 3.3 montrent l'importance du nombre de nœuds dans la direction radiale du jet. En effet, en passant de 5 à 25 nœuds (maillage intermédiaire), il est possible de mieux capter les vitesses et leurs fluctuations respectives. L'ajout de nœuds dans le jet permet également de mieux modéliser la couche limite du canal d'entrée et, par le fait même, de mieux décrire le profil de vitesse à l'entrée du brûleur. Une constatation importante peut-être effectuée par rapport aux nœuds couvrant le corps central dans la direction radiale. En effet, même si les performances des trois raffinements sont similaires près de la face du brûleur, le nombre de nœuds dans la direction radiale qui couvre le corps central semble avoir un effet sur les prédictions plus en aval. Un maillage plus fin permet de mieux modéliser le transport turbulent du tenseur de contraintes de Reynolds, aspect particulièrement important pour les modèles de second ordre. Dans le cas d'un écoulement réactif avec flamme de diffusion, il est particulièrement important de bien décrire ce caractère diffusif du jet central. Finalement, pour faire une comparaison encore plus éclairée, la valeur des résidus ainsi qu'une étude GCI sur U et u' des modèles DRSM devrait également être faite.

En ce qui concerne la précision angulaire, l'augmentation du nombre de nœuds dans la direction circonférentielle ne semble pas avoir d'effet significatif sur les composantes de vitesse observées. En effet, comme celles-ci sont dans le plan longitudinal et que l'écoulement est majoritairement orienté dans cette direction, l'effet de la composante de la troisième dimension de l'écoulement est moins importante. Le maillage intermédiaire sera également choisi ici en fonction des exigences en temps de calcul plus élevées du cas réactif. Les critères de convergence ont été fixés à 1×10^{-5} pour les résidus des équations de continuité, de conservation de quantité de mouvement (selon les 3 axes), ainsi que pour le transport de k et ϵ lors de la modélisation turbulente.

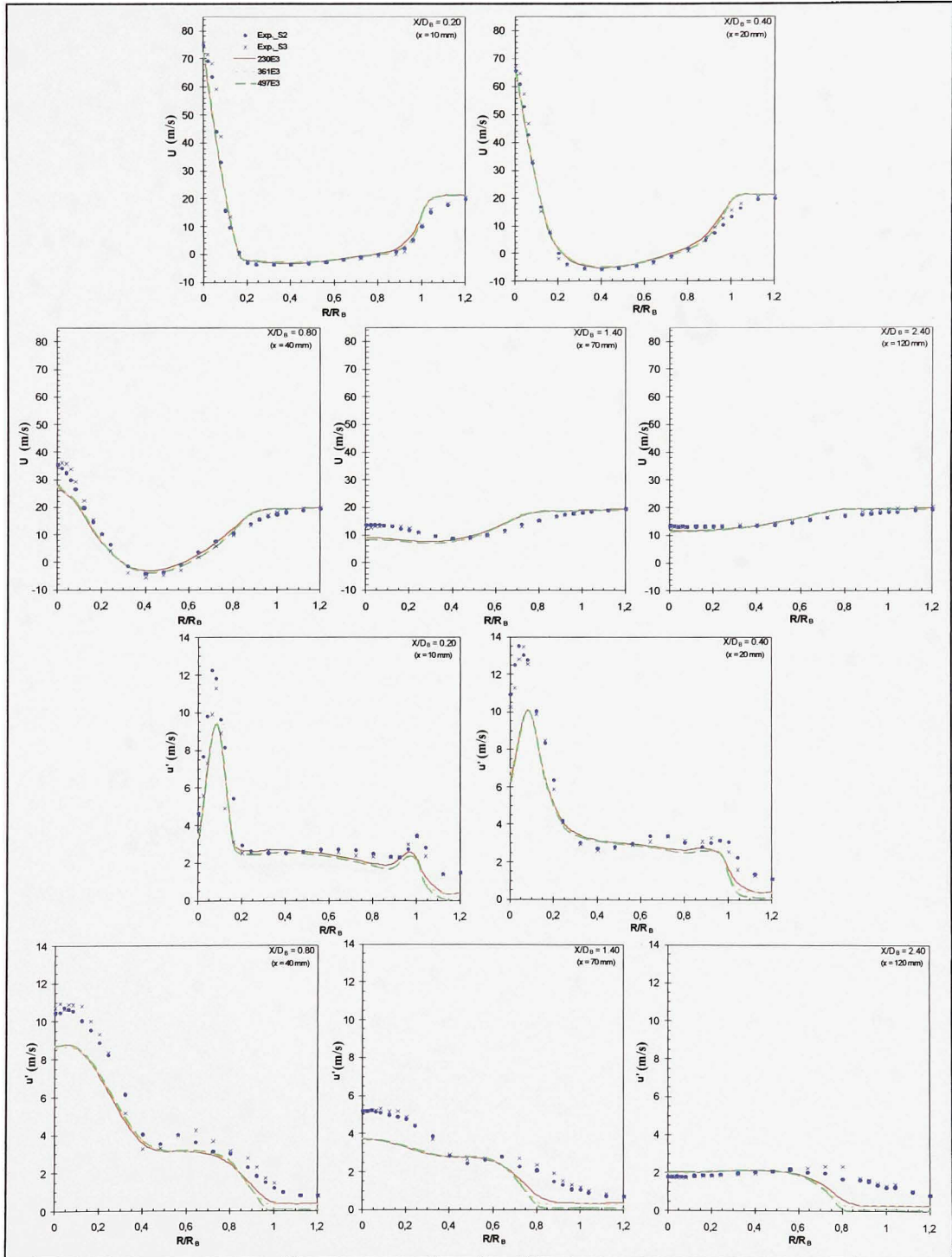


Figure 3.2 Comparaison entre les valeurs expérimentales et numériques de U et u' pour l'étude de maillage des modèles de 2 équations.

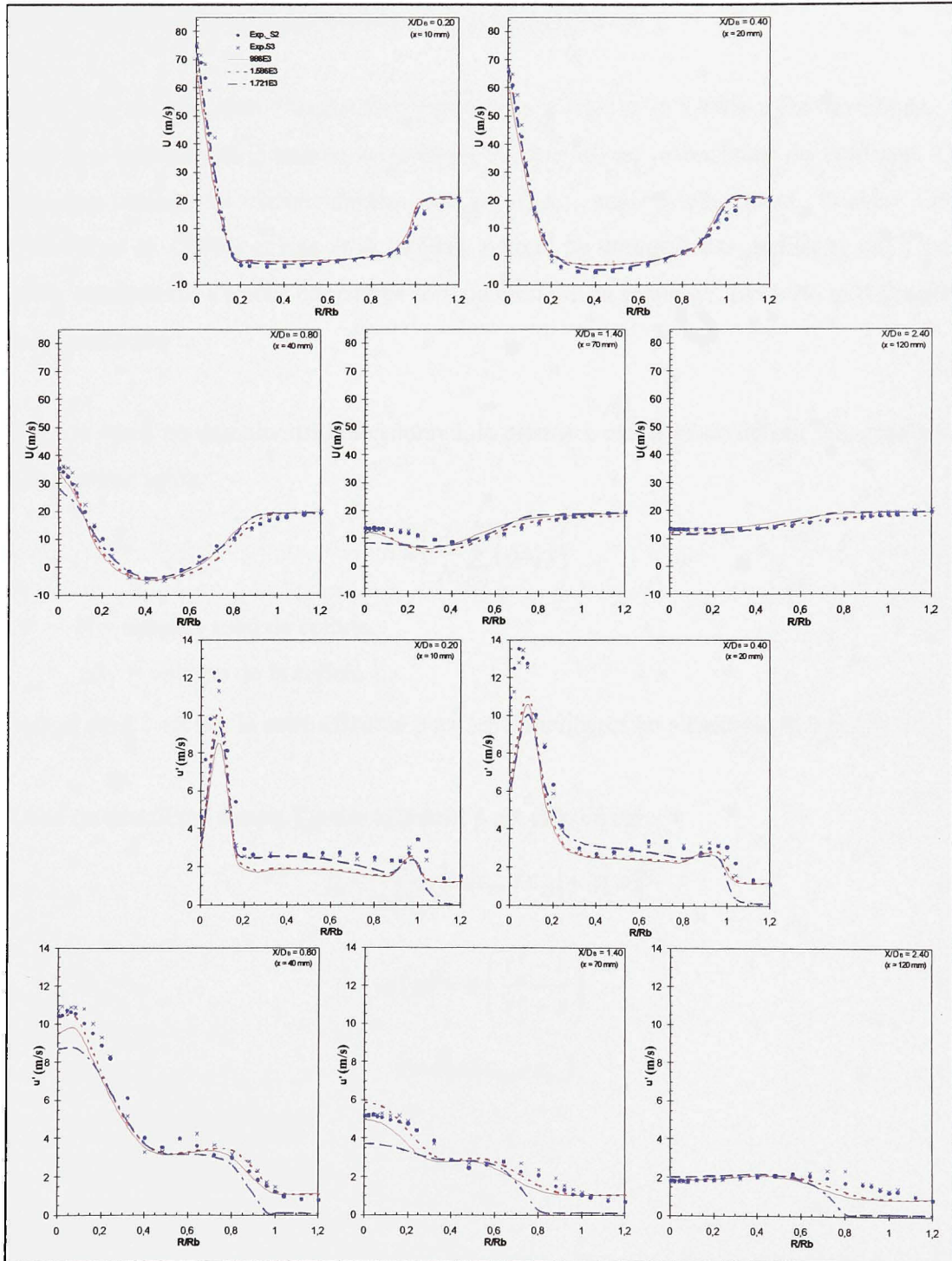


Figure 3.3 Comparaison entre les valeurs expérimentales et numériques de U et u' pour l'étude de maillage des modèles DRSM.

3.4.3 Caractérisation de l'erreur avec la technique GCI

La technique d'estimation d'erreur GCI présentée par Celik et al. (2008) a été développée afin d'aider les scientifiques à mieux caractériser l'erreur dû au raffinement du maillage. Cette technique, utilisée et recommandée par plusieurs numériciens, dont Roache (1994) Broadhead et al. (2004) et Eça et al. (2005), permet de comparé des maillages entre eux et ainsi de caractérisée l'erreur engendrée lors du choix d'un maillage. Les cinq grandes étapes sont les suivantes :

1) Dans le cas d'un domaine tridimensionnel, la première étape est de définir une grandeur de maille typique selon :

$$h = \left[\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\Delta V_i) \right]^{1/3} \quad (3.2)$$

Où N = nombre total de cellule.

ΔV_i = volume de la cellule i .

Le calcul de 3.1 est par la suite effectué pour les 3 maillages en s'assurant que $h_1 < h_2 < h_3$.

2) Dans un deuxième temps, l'ordre apparent p est calculé selon

$$p = \frac{1}{\ln(r_{21})} \left| \ln \left(\varepsilon_{32} / \varepsilon_{21} \right) + q(p) \right| \quad (3.3)$$

$$q(p) = \ln \left(\frac{r_{21}^p - s}{r_{32}^p - s} \right) \quad (3.4)$$

$$s = \text{sgn}(\varepsilon_{32} / \varepsilon_{21}) \quad (3.5)$$

Où $r_{21} = h_2/h_1$ et $r_{32} = h_3/h_2$

$\varepsilon_{32} = \phi_3 - \phi_2$ et $\varepsilon_{21} = \phi_2 - \phi_1$

ϕ représente ici la variable d'intérêt du projet de recherche. Dans le cas ici présent, la vitesse axiale moyenne U sera utilisée comme variable d'analyse. Tel qu'il a été mentionné par Dally et al. (1998a), Li et al. (2003) et Hossain et Malalasekera (2005), les prédictions

vectérielles et scalaires sont relativement bonnes dans la zone de recirculation ($X/D_B \leq 1.0$). Les auteurs mentionnent également que la principale difficulté des modèles de turbulence est de bien décrire la décroissance de la vitesse le long de l'axe central. Pour toutes ces raisons, le point de référence utilisé pour cette étude GCI (ϕ) sera localisé sur l'axe central du brûleur et à une distance axiale de $X/D_B \leq 0.8$, une station de mesure située dans la zone de recirculation. Pour être complète, l'étude GCI devrait également être faite à divers endroits du domaine. Il est important de noter que la méthode GCI mesure l'incertitude liée au maillage, mais que le modèle de turbulence demeure lui aussi une source d'«incertitude». Finalement, afin de voir l'influence du maillage sur l'écoulement réactif, l'étude GCI aurait dû être faite sur d'autres paramètres tels la température et la fraction de mélange.

Comme il peut être observé aux équations (3.2) à (3.4) ces dernières doivent être résolues de manière itérative, puisqu'il s'agit d'un ensemble d'équation implicite. Pour la première itération, la méthode suggère de calculer p en utilisant 3.2 et en ne tenant pas compte du terme $q(p)$. Des valeurs négatives de $\varepsilon_{32}/\varepsilon_{21}$ sont un indicatif d'une possible convergence oscillatoire de ce processus itératif.

3) Une fois la convergence de p obtenue, la valeur extrapolée de la variable significative est calculée selon :

$$\phi_{ext}^{21} = \frac{(r_{21}^p \phi_1 - \phi_2)}{r_{21}^p - 1} \quad (3.6)$$

4) Les erreurs numériques peuvent maintenant être estimées selon:

L'erreur approximée relative :

$$e_a^{21} = \left| \frac{\phi_1 - \phi_2}{\phi_1} \right| \quad (3.7)$$

L'erreur extrapolée relative :

$$e_{ext}^{21} = \left| \frac{\phi_{ext}^{21} - \phi_1}{\phi_{ext}^{21}} \right| \quad (3.8)$$

5) Enfin l'indice de convergence de maille (GCI) est calculé selon :

$$GCI_{fin}^{21} = \frac{1.25e_a^{21}}{r_{21}^p - 1} \quad (3.9)$$

Il est important de noter en terminant que cette marge d'incertitude ne tient pas compte des erreurs de modélisation dû au choix d'un modèle de turbulence ou de combustion en particulier, mais bien des erreurs causées par la discrétisation numérique.

3.4.4 Utilisation de la méthode GCI avec les modèles en cours

Pour utiliser la méthode GCI avec succès, le raffinement des maillages doivent être assez différent les uns des autres. En effet pour avoir une étude concluante, le modèle raffiné devrait avoir deux fois plus de cellules que le maillage intermédiaire et ce dernier devrait également être le double du raffinement par rapport au maillage grossier. Dans le cadre de ce mémoire, les grilles développées pour l'étude de maillage ont été construites avant d'utiliser la méthode GCI et aucune attention n'a été apportée quant au ratio de raffinement entre les différents maillages. Ainsi, après des calculs préliminaires de GCI sur les maillages utilisés, il n'a pu être possible d'établir un ordre apparent p plausible afin de comparer les modèles. Il n'a donc pas été possible ici d'utiliser la méthode GCI afin de prouver l'indépendance du maillage sur la solution numérique. Une étude de maille supplémentaire, contenant des maillages avec un nombre de nœuds plus étalés, devrait alors être effectuée. Malgré ce problème de caractérisation numérique, le maillage intermédiaire sera retenu pour l'étude de l'écoulement inerte.

CHAPITRE 4

PRÉSENTATION DES RÉSULTATS INERTES

Ce chapitre du mémoire présente les prédictions numériques du cas inerte air-air de Dally et al. (1998a). L'étude des modèles se divisera en deux sections, analysant respectivement les modèles à deux équations et ceux de deuxième ordre. Même si le modèle le plus performant pour l'écoulement inerte ne correspond pas nécessairement à celui du cas réactif, un seul d'entre eux sera retenu à partir des résultats obtenus ici. En effet, l'objectif de ce mémoire étant de se concentrer sur les conditions aux limites, le meilleur modèle de turbulence de l'écoulement inerte sera assumé comme valide pour l'écoulement réactif. Ce dernier sera sélectionné à partir des performances de prédiction et en fonction du coût de calcul s'y rattachant. Finalement, suite aux conclusions des premiers résultats inertes et de l'analyse s'y rattachant, une étude complémentaire sera faite quant à l'influence des conditions aux limites de l'écoulement annulaire sur la prédiction des caractéristiques de l'écoulement turbulent.

4.1 Modèles de deux équations

Les modèles de turbulence à deux équations utilisées ont été choisis pour leur stabilité, leur robustesse de convergence et leur haut degré de validation Dally et al. (1998a), Hossain et al. (2001), Yan et al. (2004), Ravikanti et al. (2009). Le modèle k-epsilon est utilisé à prime abord, car il constitue une première approche classique et fréquente pour modéliser la turbulence. Le modèle SST sera employé dans un second temps afin de vérifier l'amélioration des performances près des parois. Cet aspect est tout particulièrement important dans la région des parois du jet central et de l'écoulement annulaire lors de leur entrée dans le domaine effectif de combustion. La description de la couche limite est importante, car comme il a été mentionné par Ravikanti et al. (2009), une bonne description des conditions aux limites est très importante afin d'obtenir de bonnes prédictions pour les stations de mesures plus loin en aval. Finalement, toujours en vue d'améliorer les prédictions en aval de la zone d'injection, le modèle k-epsilon EARSM sera exploré afin de valider

l'effet de l'ajout d'une équation de transport supplémentaire pour le tenseur de contraintes de Reynolds.

Les Figures 4.1 et 4.2 présentent les résultats des trois modèles de deux équations utilisés. De manière générale, il y a une bonne concordance entre les données expérimentales de vitesses axiales (U , u') et les valeurs numériques jusqu'à une distance axiale d'environ $X/D_B \approx 0.8$. Tel que démontré sur les profils des vitesses axiales (U) et radiales (V) de la Figure 4.1 et la Figure 4.2, l'introduction du canal du jet semble avoir été une bonne approche pour définir la vitesse d'entrée dans le domaine effectif de combustion. En effet, les résultats numériques sous-estiment d'environ seulement au maximum 2.5% les valeurs expérimentales. Une différence importante entre les données expérimentales et résultats numériques peut être observée près de la région de la paroi interne de l'écoulement annulaire. Deux raisons principales pourraient expliquer cette différence. Premièrement, il est possible que la description de la couche limite soit responsable du manque de cohérence des résultats numériques. Par contre, même en utilisant un modèle de turbulence décrivant mieux l'écoulement près de la paroi (SST) et avec une distance adimensionnelle de paroi (y^+) inférieure au modèle $k-\epsilon$ classique (2.44 vs 11.1), les résultats ne semblent pas s'améliorer.

La deuxième raison qui pourrait expliquer cette disparité a été présentée par Ravikanti et al. (2009) et est reliée à l'inexactitude des conditions aux frontières de l'écoulement annulaire. En effet, contrairement au profil de vitesse turbulent du jet qui peut être considéré comme pleinement développé par le montage expérimental, le profil annulaire est beaucoup plus difficile à décrire.

La différence entre les résultats numériques et expérimentaux de l'écoulement annulaire de cette région est également un problème qui a été rencontré par Raman et Pitsch (2005). En imposant un profil de vitesse moyenne avec une intensité de turbulence fixe, les auteurs en sont arrivés à la conclusion que cette condition menait à une sous-estimation de la turbulence dans la zone de cisaillement de l'écoulement annulaire. Tel qu'observé à la Figure 4.1, ce même comportement peut être observé dans la zone radiale $r/R_B = 1$, où les vitesses axiales

sont surestimées et les fluctuations respectives sont sous-estimées. Ces erreurs de prédictions pourrait également être dû à une faible intensité de la turbulence (sous-estimation de u') qui ne perturberait pas assez l'écoulement pour le freiner suffisamment (surestimation de U). Plus loin en aval, toutes les stations de mesures semblent affectées aux alentours de cette distance radiale.

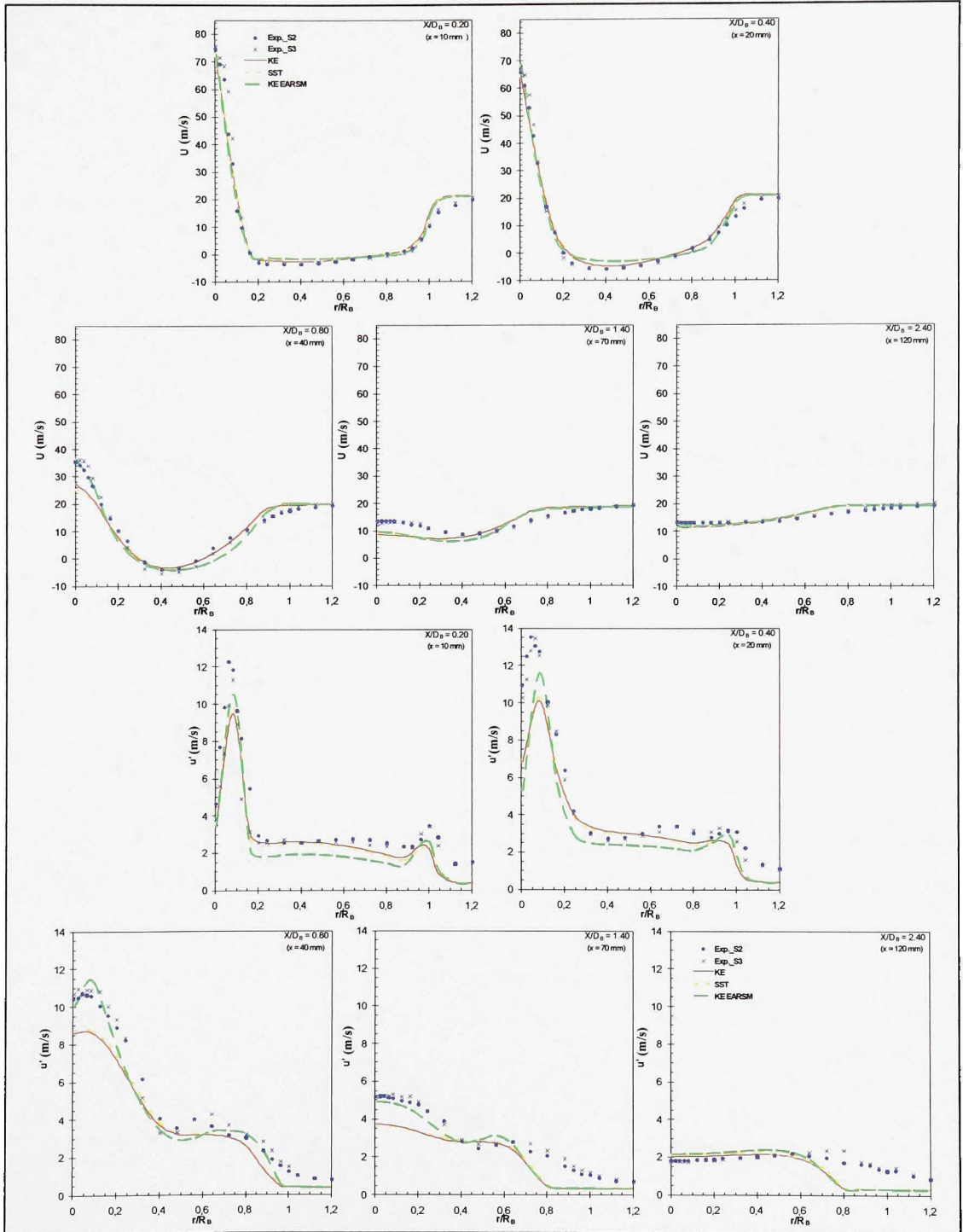


Figure 4.1 Comparaison entre les valeurs calculées et mesurées de U et u' pour l'étude des modèles de 2-équations.

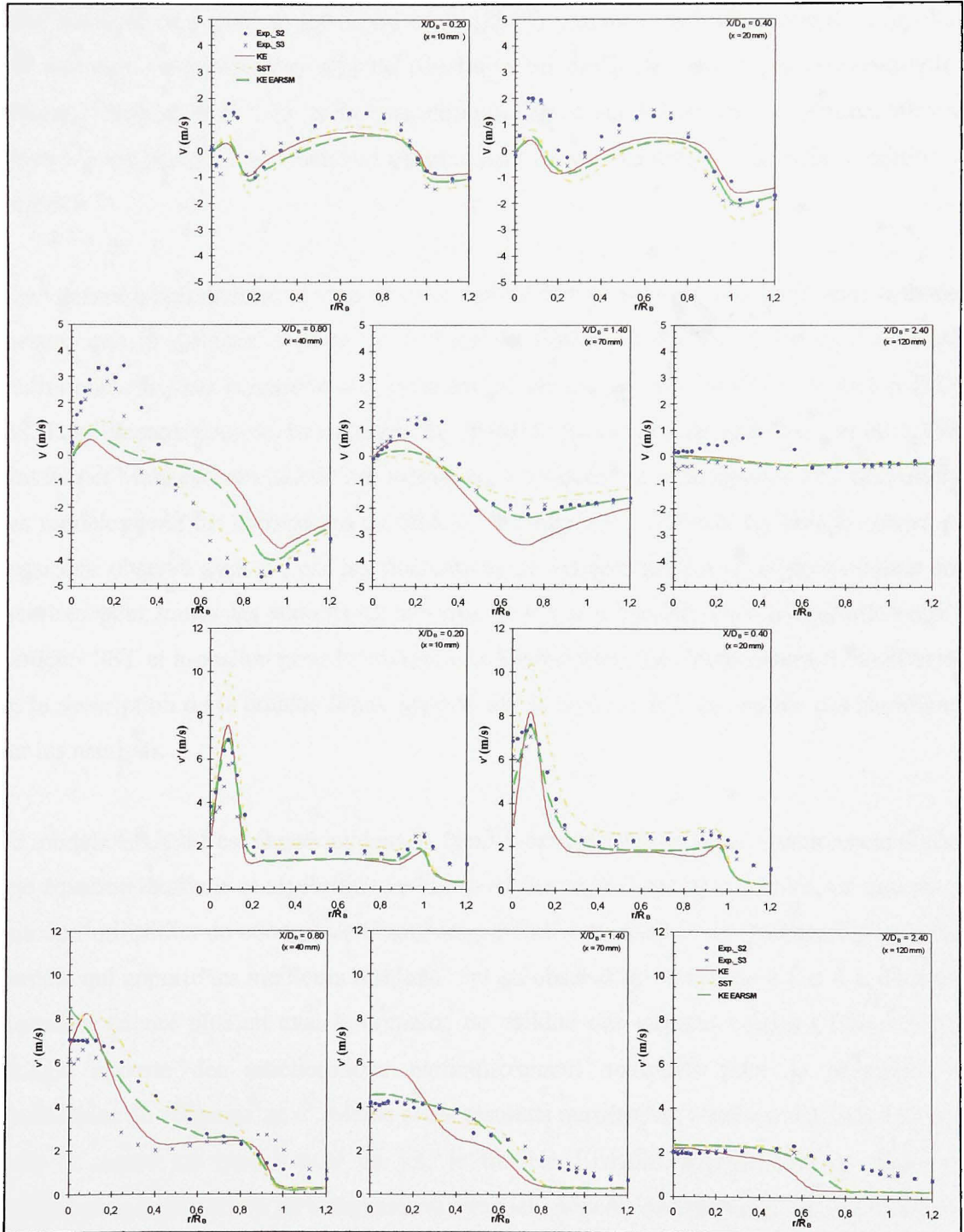


Figure 4.2 Comparaison entre les valeurs calculées et mesurées de V et v' pour l'étude des modèles de 2-équations.

Pour résoudre ce problème Ravikanti et al. (2009) proposent une technique d'extrapolation des données expérimentales afin de construire un profil de vitesse plus représentatif du montage expérimental. Une technique similaire basée sur les données expérimentales sera présentée un peu plus loin dans ce chapitre afin de voir l'influence de cette condition aux limites.

Les vitesses longitudinales le long de l'axe central ($r = 0$) ont tendance à être sous-estimées à mesure que la distance à partir de la face du brûleur augmente. En effet, les modèles traditionnels de deux équations sous-estiment la vitesse moyenne axiale dès la station $X/D_B = 0.8$. Possiblement à cause du caractère dissipatif de l'énergie cinétique Dally et al. (1998a). Hossain et Malalasekera (2005) ont même remis en question la pertinence de l'utilisation de ces modèles pour les simulations du brûleur de Dally et al. (1998a). Ce comportement peut aussi être observé avec u' , car les fluctuations de vitesses axiales sont généralement sous-estimées pour toutes les stations de mesures. Il y a peu de différence perceptible entre les modèles SST et k-epsilon pour la composante longitudinale de l'écoulement. L'amélioration de la description de la couche limite apporté par le modèle SST ne semble pas significative sur les résultats.

Le modèle EARSM est classé ici dans la famille des modèles de deux équations car il résout une équation explicite et algébrique de transport des contraintes de Reynolds, un peu comme lors de l'utilisation du concept de Boussinesq. Parmi cette famille de modèle, il représente le modèle qui apporte les meilleurs résultats. Tel qu'observé sur la Figure 4.1 et 4.2, en plus de repousser encore plus en aval le domaine de validité des vitesses axiales ($X/D_B = 0.8$), le modèle apporte des améliorations particulièrement marquées pour la prédiction des fluctuations de vitesse u' et v' . Même si les résultats numériques continuent à sous-estimer u' dans la région de cisaillement du jet, le modèle EARSM apporte tout de même une amélioration significative en comparaison avec les modèles traditionnels. Cette "supériorité" du modèle EARSM est encore plus perceptible dans les régions plus en aval. Grâce à sa modélisation plus complète du transport du tenseur de contraintes de Reynolds, il réussit à mieux décrire la diffusion du jet central dans la presque totalité des stations de mesures.

En ce qui concerne la composante radiale de l'écoulement, les prédictions de V sont généralement les mêmes pour tous les modèles. Alors que V est généralement sous-estimé dans la zone de recirculation identifiée à la Figure 1.1, les prédictions ont tendance à s'améliorer dans les zones subséquentes. Comme il peut être observé à la Figure 4.2, l'ordre de grandeur de v' est supérieur à V et cela semble se traduire par de meilleures prédictions des fluctuations que des vitesses moyennes dans cette direction. Similairement au cas radial, le modèle EARSM est celui qui se démarque plus des autres en apportant de meilleurs résultats jusqu'à $X/D_B = 2.4$.

Tel qu'indiqué dans le manuel de l'utilisateur ANSYS_inc (2009) et par les résultats inerte, les meilleures performances du modèle EARSM semblent démontrer que la formulation explicite et algébrique présenté par Wallin et Johansson (2000) permet de mieux décrire les écoulements comprenant des lignes de courant fortement courbées et des systèmes en rotation (zones de recirculation). Ainsi, la formulation du modèle EARSM, permettant de se délivrer de l'hypothèse de Boussinesq, semble mieux adaptée pour modéliser la turbulence anisotropique générée dans cet écoulement.

L'amélioration des prédictions de u' et v' apportée par le modèle k-epsilon EARSM en font un choix privilégié pour la combustion. Comme la flamme et ses caractéristiques (températures, espèces, etc.) sont caractérisées par de forts gradients, il est important d'avoir un modèle de turbulence qui décrit bien la variation des grandeurs scalaires et vectorielles.

4.2 Modèle DRSM

Comme il a été introduit précédemment, les modèles de deuxième ordre ont l'avantage de mieux prédire les fluctuations de l'écoulement, dû à leurs formulations plus complètes pour décrire le transport du tenseur des contraintes de Reynolds. En plus des ressources de calcul plus élevé qu'ils demandent, une autre difficulté rencontrée par ces modèles vient d'un point de vue de stabilité numérique. Dans le cas des modèles DRSM, la convergence peut s'avérer plus ardue, car les modèles utilisés pour fermer ces équations différentielles ne sont pas de

premier (comme dans le cas des modèles k-epsilon), mais de second ordre. Dépendamment des cas, la méthode de résolution numérique peut avoir de la difficulté à converger les résultats numériques. Cette considération est cependant moins importante dans le cas d'écoulement inerte ne contenant pas d'équations supplémentaires de chimie à résoudre. Les Figures 4.3 et 4.4 présentent les résultats des modèles DRSM, dont le premier modèle introduit par Launder (1989) (LRR), les deux versions modifiées de LRR proposées par Li et al. (2003) (BM-M1 et BM-M2) ainsi que le modèle SSG de Speziale et al. (1991).

En comparaison avec les modèles à deux équations classiques, les modèles de deuxième ordre apportent de meilleures prédictions des vitesses et de leurs variations respectives. En effet, même à de grandes distances longitudinales, la vitesse de l'axe central continue de mieux être prédite. Par contre, comme les modèles de deux équations, les modèles DRSM n'arrivent pas également à prédire correctement les fluctuations de vitesse axiales dans les environs de la face du brûleur.

Le fort cisaillement du jet central est encore une zone difficile à prédire avec les modèles DRSM et cette difficulté à bien prédire les gradients de vitesse élevés a également été identifié par Dally et al. (1998a). À mesure que le cisaillement diminue en aval, les performances des modèles DRSM ont tendance à s'améliorer. Cette corrélation avec l'intensité du cisaillement peut également être observée avec les composantes radiales de l'écoulement. En effet, comme l'écoulement est fortement orienté dans la direction longitudinale, les gradients de fluctuations de v' sont faibles et les modèles DRSM assurent de relativement bonnes prédictions tout au long du domaine. La modification apportée par Li et al. (2003) sur le modèle de base LRR apporte une amélioration seulement dans la zone avoisinant le brûleur, i.e. $X/D_B \leq 0.4$. Même si les prédictions des modèles SSG et BM-M2 sont similaires dans la zone $X/D_B \leq 0.4$, leurs performances se dégradent dans les stations en aval.

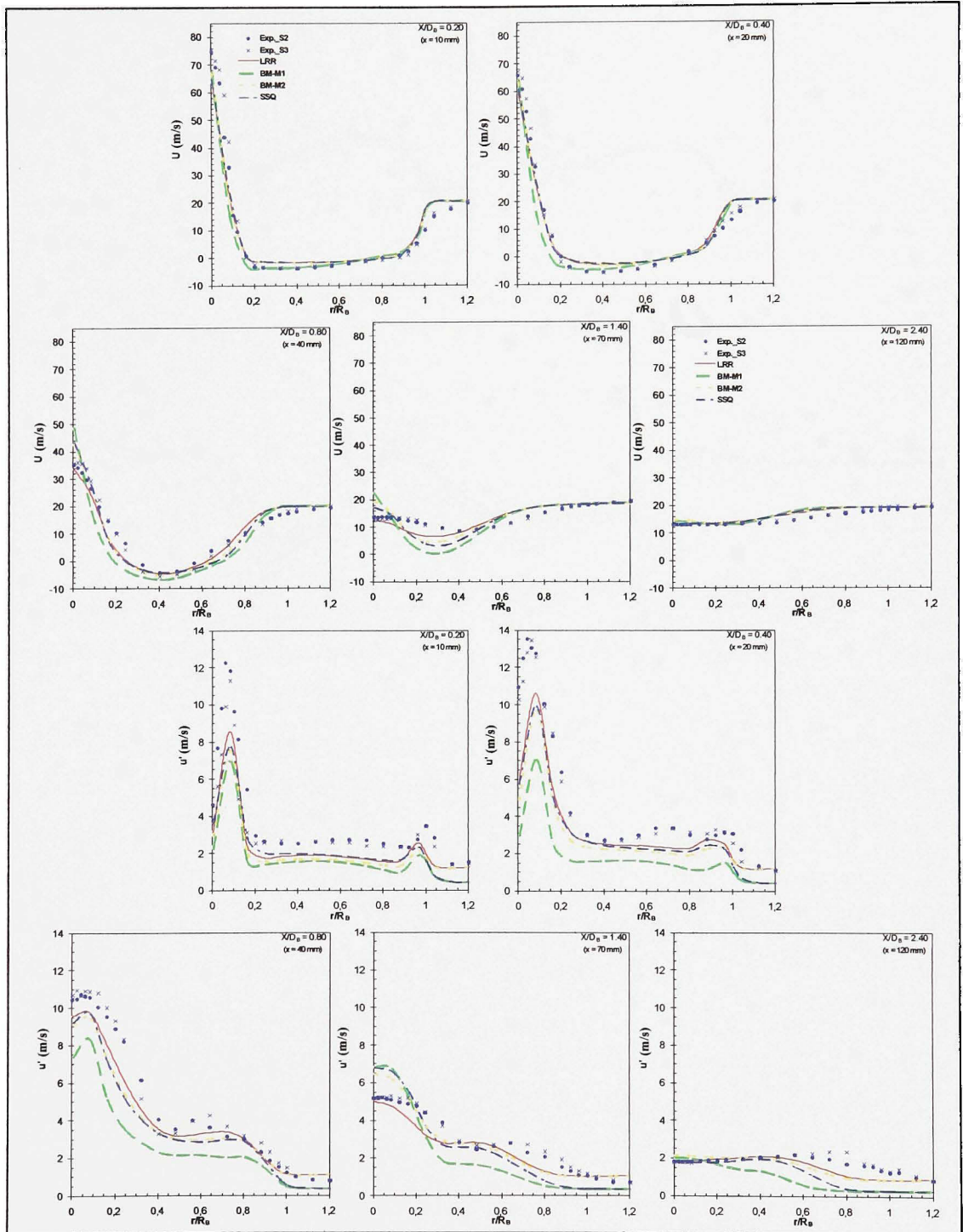


Figure 4.3 Comparaison entre les valeurs calculées et mesurées de U et u' pour l'étude des modèles de DRSM.

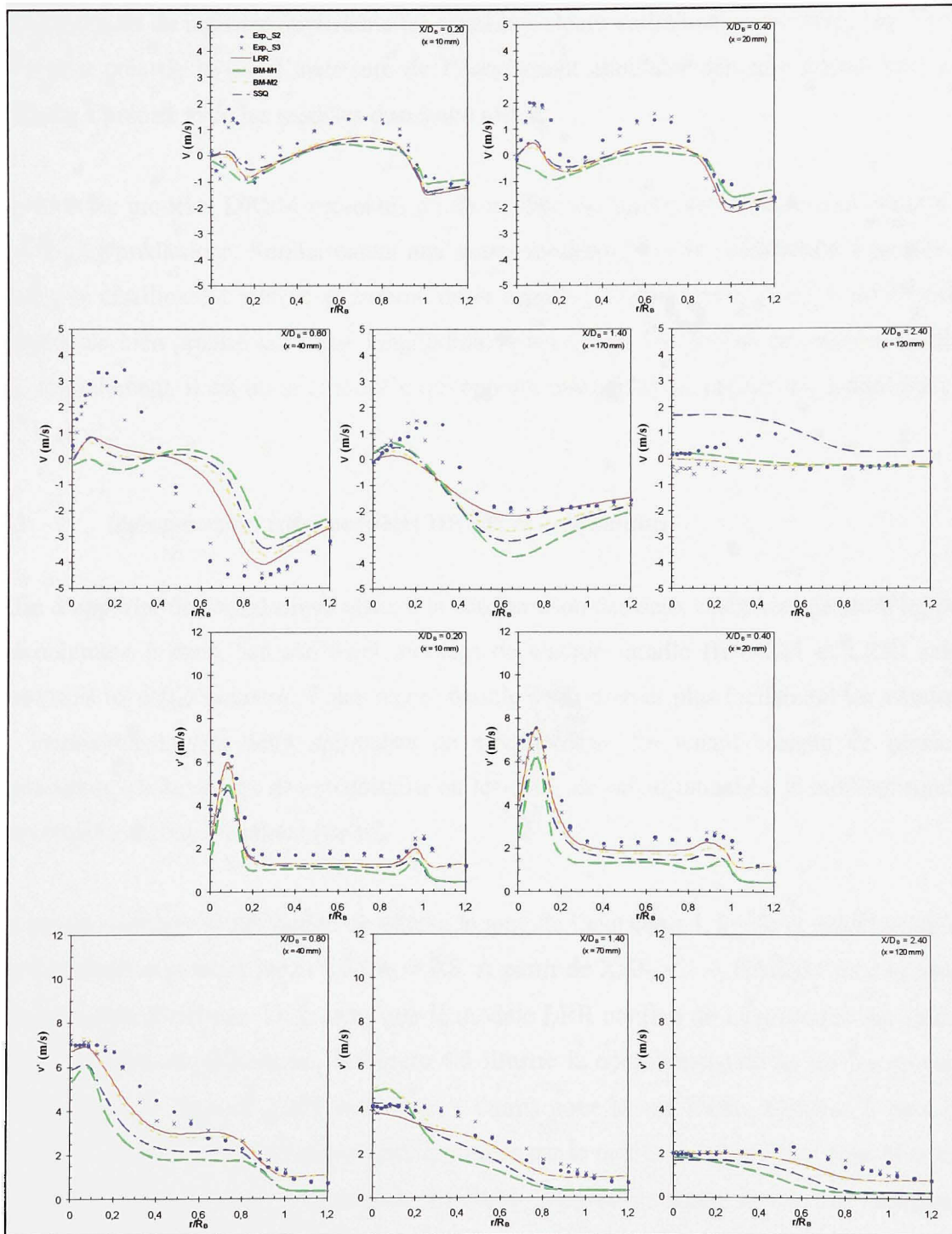


Figure 4.4 Comparaison entre les valeurs calculées et mesurées de V et v' pour l'étude des modèles de DRSM.

et surestiment de manière importante les vitesses et leurs variations respectives. Finalement, la région près de la paroi intérieure de l'écoulement annulaire demeure encore une zone difficile à prédire avec les modèles de second ordre.

De tous les modèles DRSM présentés ici, le modèle de base LRR est celui qui apporte les meilleures prédictions. Similairement aux autres modèles, il a de la difficulté à prédire les zones de cisaillement interne et externe de la Figure 1.2. Par contre, il est le seul modèle capable de bien prédire la vitesse longitudinale pour toutes les stations de mesures étudiées ici. Radialement, il est aussi le modèle qui apporte les meilleures prédictions autant pour U , u' , V et v' .

4.3 Comparaison entre modèles DRSM et 2-équations

Afin d'apporter des conclusions quant à la comparaison des deux catégories de modèles pour l'écoulement à froid, les meilleurs modèles de chaque famille (EARSM et LRR) seront comparés ici conjointement. Il sera alors possible de distinguer plus facilement les avantages et inconvénients des deux approches de modélisation. En tenant compte de plusieurs paramètres tels la qualité des prédictions ou les coûts de calcul rattachés, le meilleur modèle sera choisi pour l'écoulement réactif.

En ce qui concerne la prédiction de vitesse le long de l'axe central, les deux modèles ont des performances similaires jusqu'à $X/D_B = 0.8$. À partir de $X/D_B = 1.4$, EARSM sous-estime la vitesse axiale d'environ 23%, alors que le modèle LRR continu de bien prédire les valeurs. Pour présenter ce phénomène, la Figure 4.5 illustre la décroissance de la vitesse moyenne longitudinale le long de l'axe central ($r = 0\text{mm}$) pour le cas inerte. Comme il peut être observé, les meilleures prédictions sont apportées par le modèle LRR qui performe bien dans l'ensemble du domaine. Le modèle EARSM représente quant à lui une alternative intéressante au modèle k-epsilon classique et améliore sensiblement les résultats jusqu'à $X/D_B \leq 1.4$. Une fois de plus, les modèles DRSM performant mieux dans ce cas expérimental.

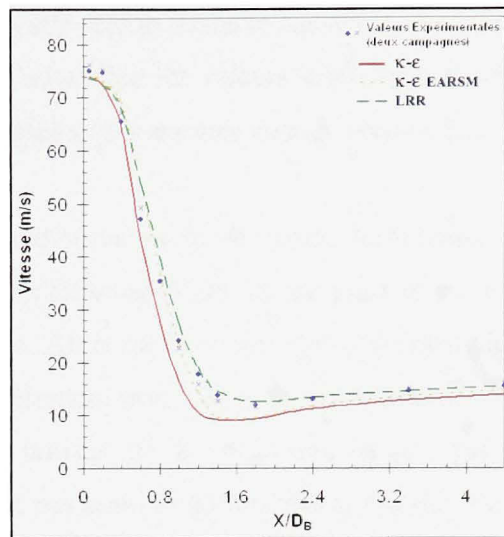


Figure 4.5 Comparaison entre les valeurs calculées et mesurées des différents modèles de turbulence pour la prédiction de la vitesse moyenne le long de l'axe central.

Les Figure 4.6 et 4.7 montrent les profils de vitesses et leurs variations respectives, pour les composantes axiales et radiales de l'écoulement. De manière générale, les deux modèles apportent des prédictions similaires autant pour U et u' que V et v' . Pour les variations de vitesses axiales, EARSM sous-estime également les fluctuations de vitesse pour toutes les stations de mesures. Ce caractère typique de la dissipation turbulente, engendrée par l'utilisation du modèle k-epsilon, a également été observé par Papageorgakis et Assanis (1999). Le modèle LRR performe légèrement mieux dans les zones de cisaillements interne et externes de la Figure 1.2 et semble mieux disposé à représenter le transport turbulent de u' .

Une fois de plus, la zone de cisaillement du jet demeure une région difficile à simuler et les prédictions de V ont tendance à s'améliorer en s'éloignant de cette zone. L'hypothèse de Ravikanti et al. (2009) selon laquelle les conditions aux limites annulaires influencent la structure turbulente peut également être observée ici. Bien qu'une étude de conditions aux limites n'ait pas été effectuée jusqu'à maintenant, la sous-estimation de V près de la face du brûleur ($X/D_B \leq 0.4$) pourrait potentiellement indiquer un problème dans la prédiction de la largeur du tourbillon extérieur tel qu'illustré à la Figure 4.8. De plus, la sous-estimation de v' dans la région annulaire semble à nouveau démontrer que les grandeurs turbulentes ne sont

pas bien représentées dans cette région. Dans le cas de v' , et ce contrairement aux prédictions de u' , le modèle EARSM, surestime les valeurs expérimentales. Plus de détails concernant les incertitudes expérimentales sont présentés dans la section 5.2.

Dans un but d'analyse qualitative de la structure turbulente, la Figure 4.8 montre une comparaison entre les lignes de courant de vitesse pour le cas expérimental ainsi que pour trois modèles de turbulence. Alors que les données expérimentales présentées originalement par Dally et al. (1998a) présentent trois zones de recirculation tel qu'illustré à la Figure 4.8, tous les modèles RANS utilisés ici ne prédisent que la présence de deux tourbillons contrarotatifs. En ne tenant pas compte du tourbillon central, tous les modèles réussissent à bien prédire les dimensions radiales des zones de recirculation interne et externe.

En résumé, il est difficile d'établir une supériorité claire d'un modèle par rapport à l'autre en regardant les résultats de U , u' , V et v' . De plus, en observant de manière qualitative les structures turbulentes des tourbillons contrarotatifs, les modèles EARSM et LRR prédisent des zones de recirculation similaires. Suite aux conclusions de Ravikanti et al. (2009), par rapport à l'importance des conditions aux limites annulaire, les résultats du modèle EARSM pourraient être appelés à s'améliorer avec une description plus adéquate de l'écoulement annulaire. En tenant compte des ressources informatiques et du temps de calcul engendré par le maillage de 360° des modèles de second ordre classique, le modèle EARSM devient une alternative très intéressante au modèle LRR. La robustesse du modèle EARSM (basé sur le modèle classique k-epsilon) combiné à l'économie de temps de calcul en fait une alternative intéressante pour le cas de combustion. La résolution algébrique de l'équation du tenseur de contraintes de Reynolds est une approche intéressante qui permet d'économiser des ressources de calcul, qui pourront être transférées pour le cas réactif beaucoup plus demandant.

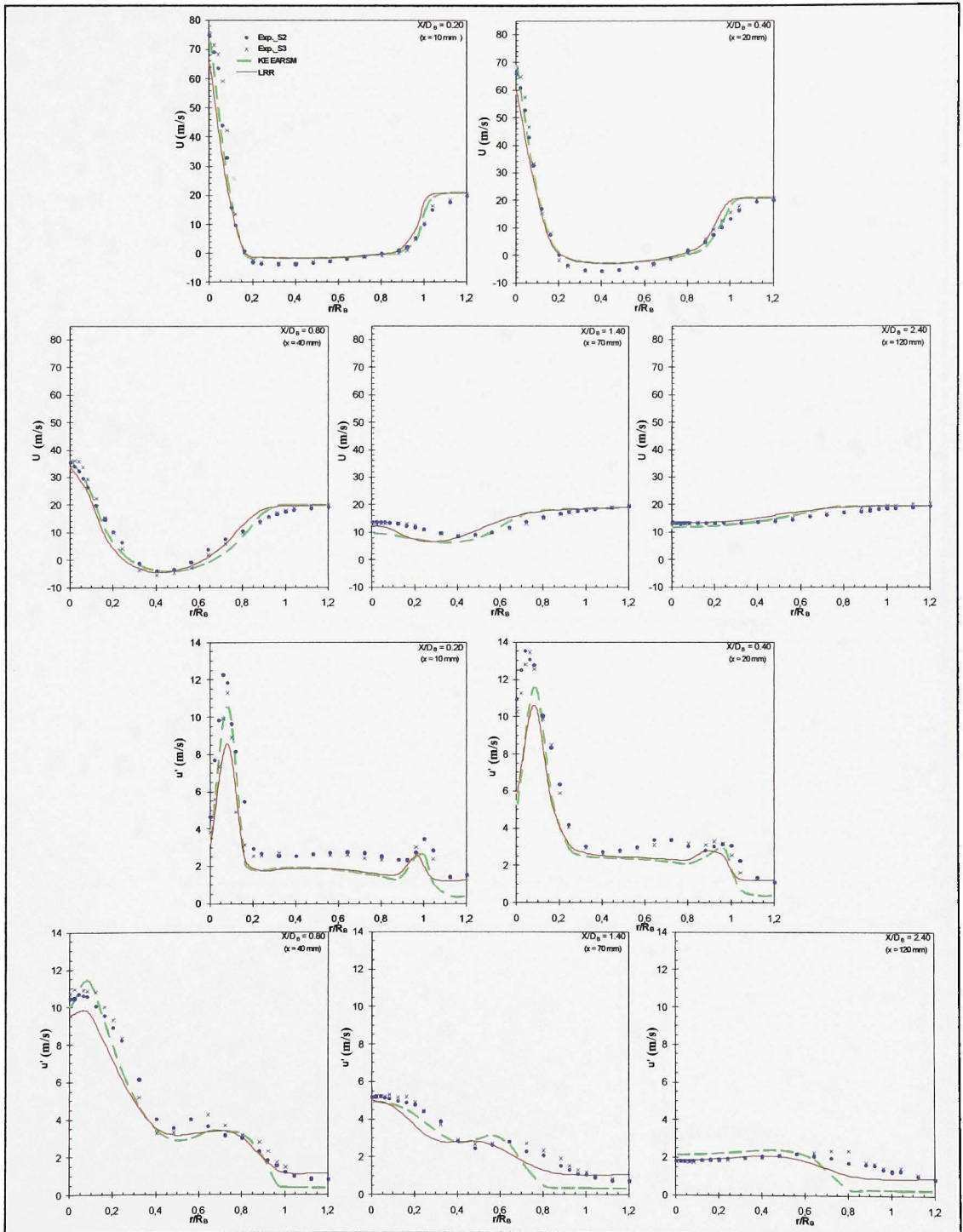


Figure 4.6 Comparaison entre les valeurs calculées et mesurées de U et u' pour l'étude comparative des modèles DRSM et 2-équations.

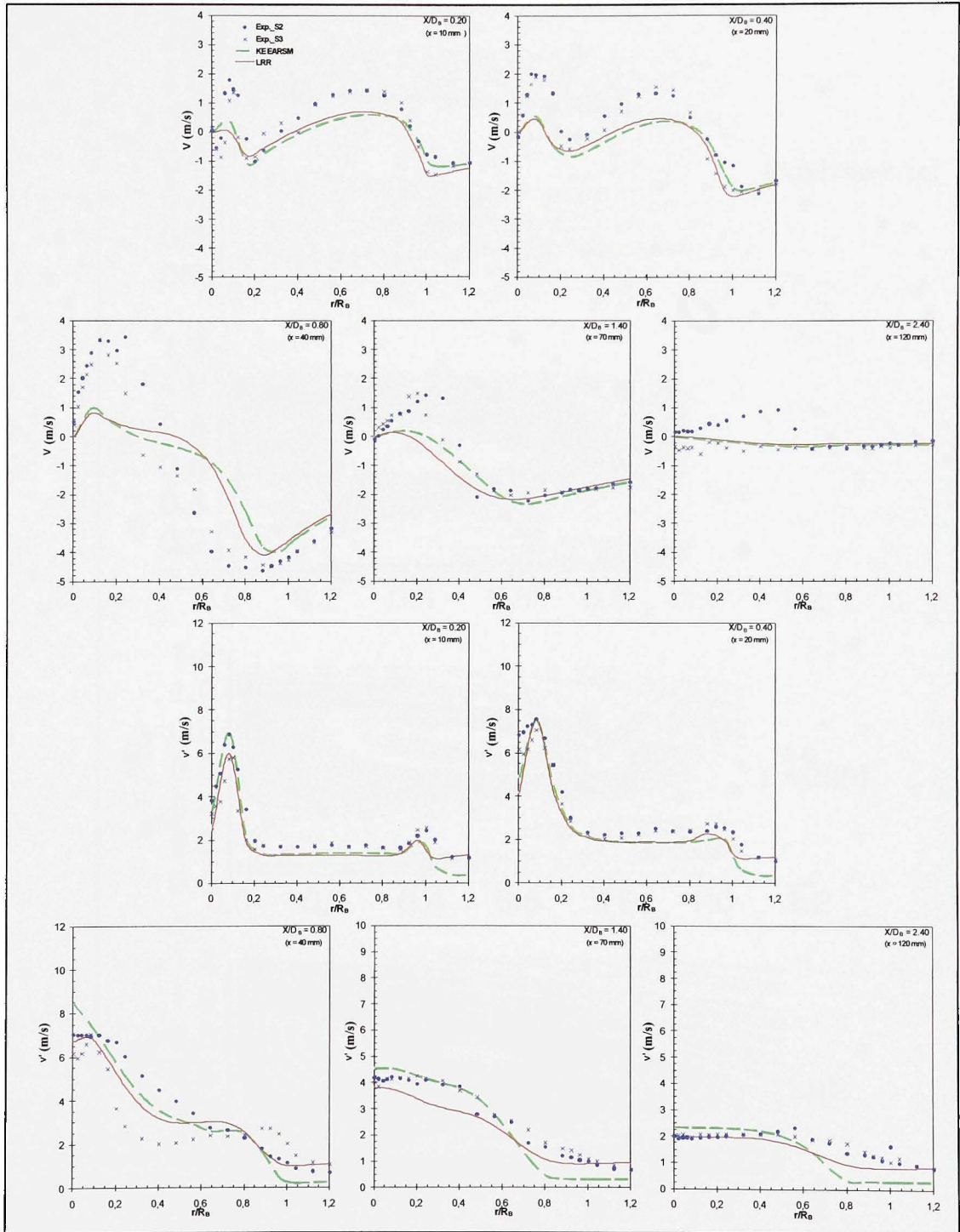


Figure 4.7 Comparaison entre les valeurs calculées et mesurées de V et v' pour l'étude comparative des modèles DRSM et 2-équations.

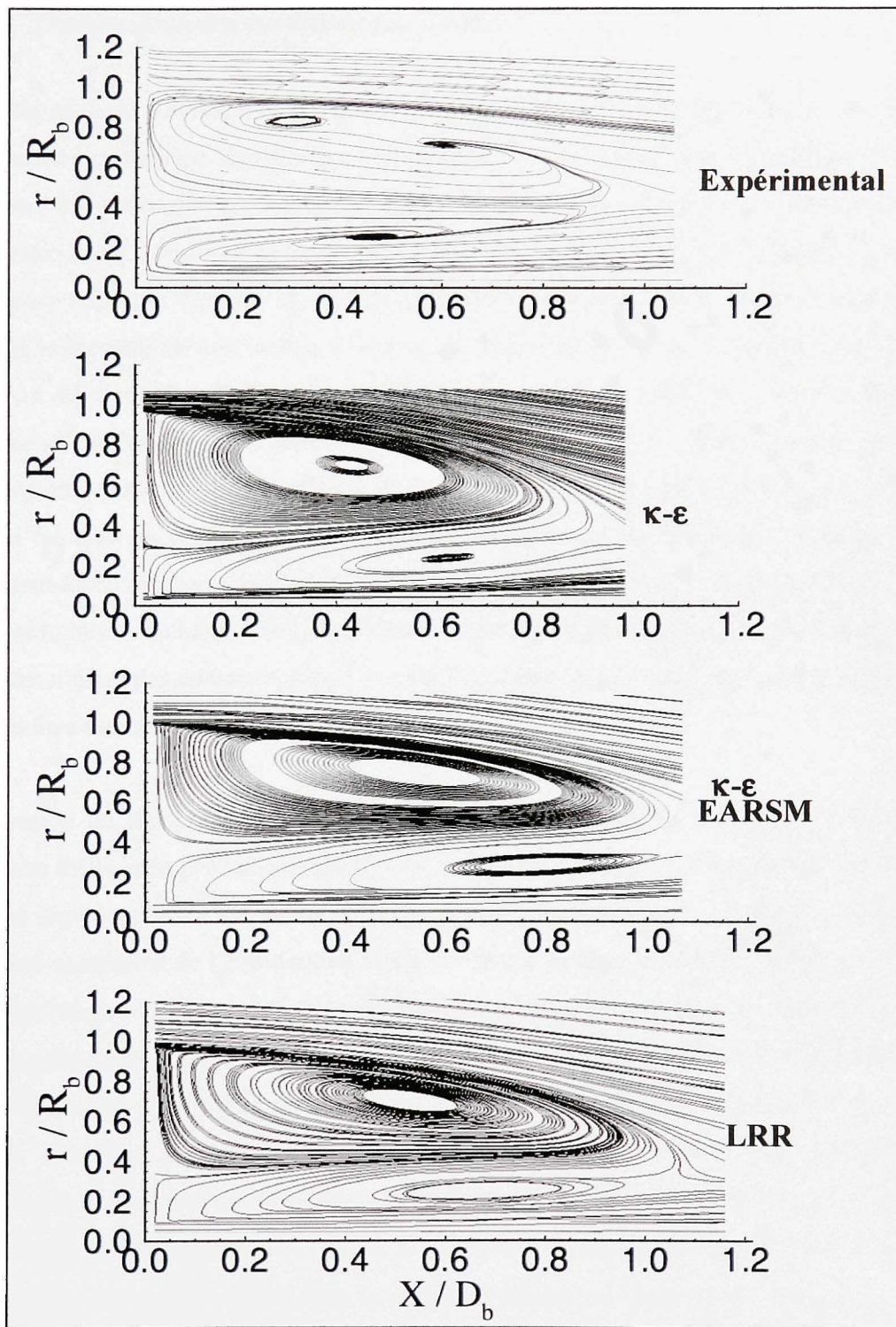


Figure 4.8 Comparaison entre les résultats expérimentaux de Dally et les lignes de courant numériques pour les vitesses de l'écoulement à froid.

4.4 Comparaison des conditions aux limites

Tel que suggéré par Ravikanti et al. (2009) les conditions aux limites de l'écoulement latéral modifieraient de manière significative les résultats en aval de la face du brûleur. Dû aux dimensions du montage expérimental, l'écoulement annulaire ne peut pas être considéré comme pleinement développé et les conditions aux limites sont complexes à décrire. Dans le but d'apporter une plus grande "exactitude" aux simulations numériques, Dally et al. (1998a) ont publié les conditions aux limites à l'entrée du domaine effectif de combustion (profils de vitesses et d'intensité turbulente) pour l'écoulement axial. Afin de s'assurer que les conditions d'entrée de l'écoulement annulaire correspondent à celles fournies dans la littérature, un second maillage, utilisant la même discrétisation que le modèle de 361 000 nœuds, a été créé en enlevant le canal d'entrée annulaire de la Figure 3.1. Comme le jet central peut-être considéré comme pleinement développé, le canal d'entrée a été conservé pour les simulations numériques. Les profils d'entrée des vitesses moyennes et des intensités turbulentes n'étant pas constants pour l'écoulement annulaire, les valeurs expérimentales ont été introduites directement dans CFX.

L'observation de Ravikanti et al. (2009) affirmant que la largeur du tourbillon principal externe soit influencée par les conditions aux limites annulaire peut être illustrée à la Figure 4.9. Cette figure présente les zones de recirculation principale pour l'étude des conditions aux limites annulaires de l'écoulement inerte. L'image du haut montre les lignes de courant du champs moyen de la simulation en utilisant des conditions aux limites uniformes (CFU) alors que celle du bas utilise des conditions aux limites expérimentales (CFE). En comparant les tourbillons des deux types de conditions aux limites, la largeur du tourbillon extérieur augmente d'environ $0.1 r/R_b$ (2.5mm) lorsque les CFE sont utilisés. Dans la direction longitudinale, la longueur du tourbillon extérieur semble demeurer essentiellement la même. Tel qu'illustré sur les Figures 4.10 et 4.11 la modification des conditions aux limites apporte non seulement des améliorations dans la région annulaire de l'écoulement ($r/R_b \geq 1$), mais également dans la zone centrale du corps du brûleur. Même si seulement une mince

amélioration est apportée aux vitesses moyennes U et V dans cette région, les prédictions de u' et v' sont quant à elles améliorées et ce, pour toutes les stations de mesures.

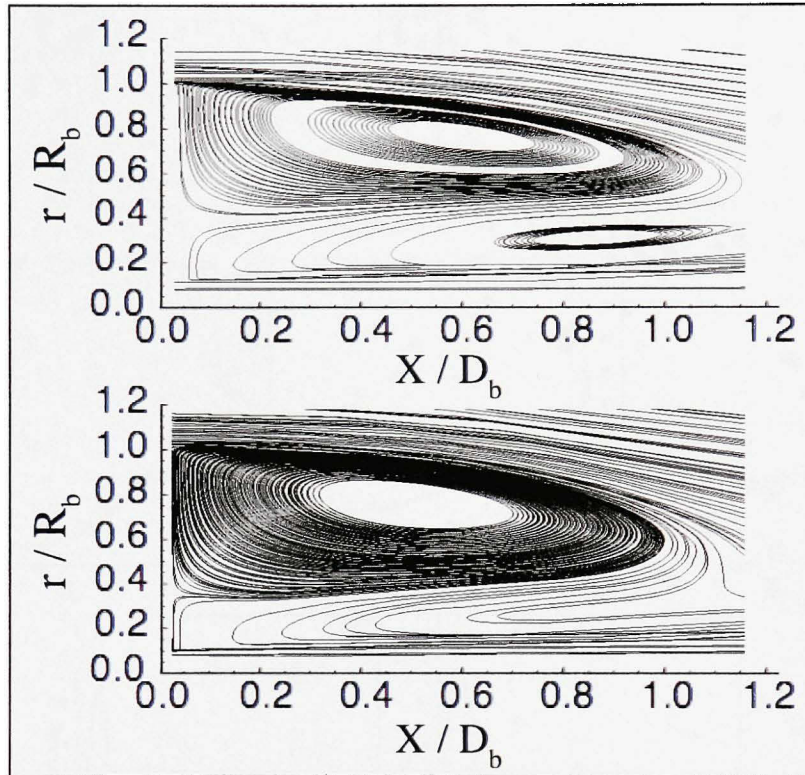


Figure 4.9 Zones de recirculation des modèles à CFU (haut) et CFE (bas) pour l'étude des conditions aux limites annulaires de l'écoulement inerte.

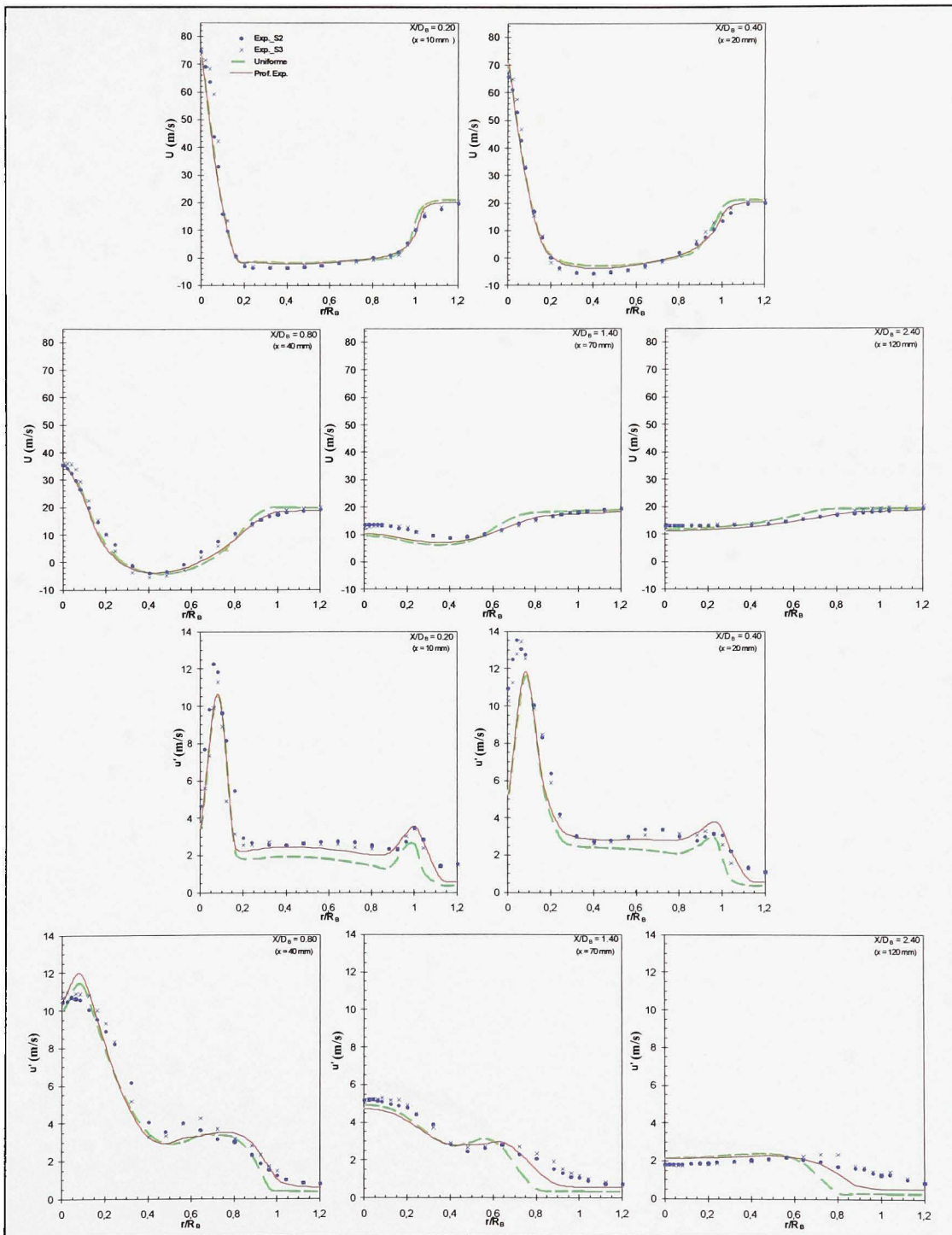


Figure 4.10 Comparaison entre les valeurs expérimentales et numériques de U et u' pour l'étude comparative des conditions aux frontières de l'écoulement à froid.

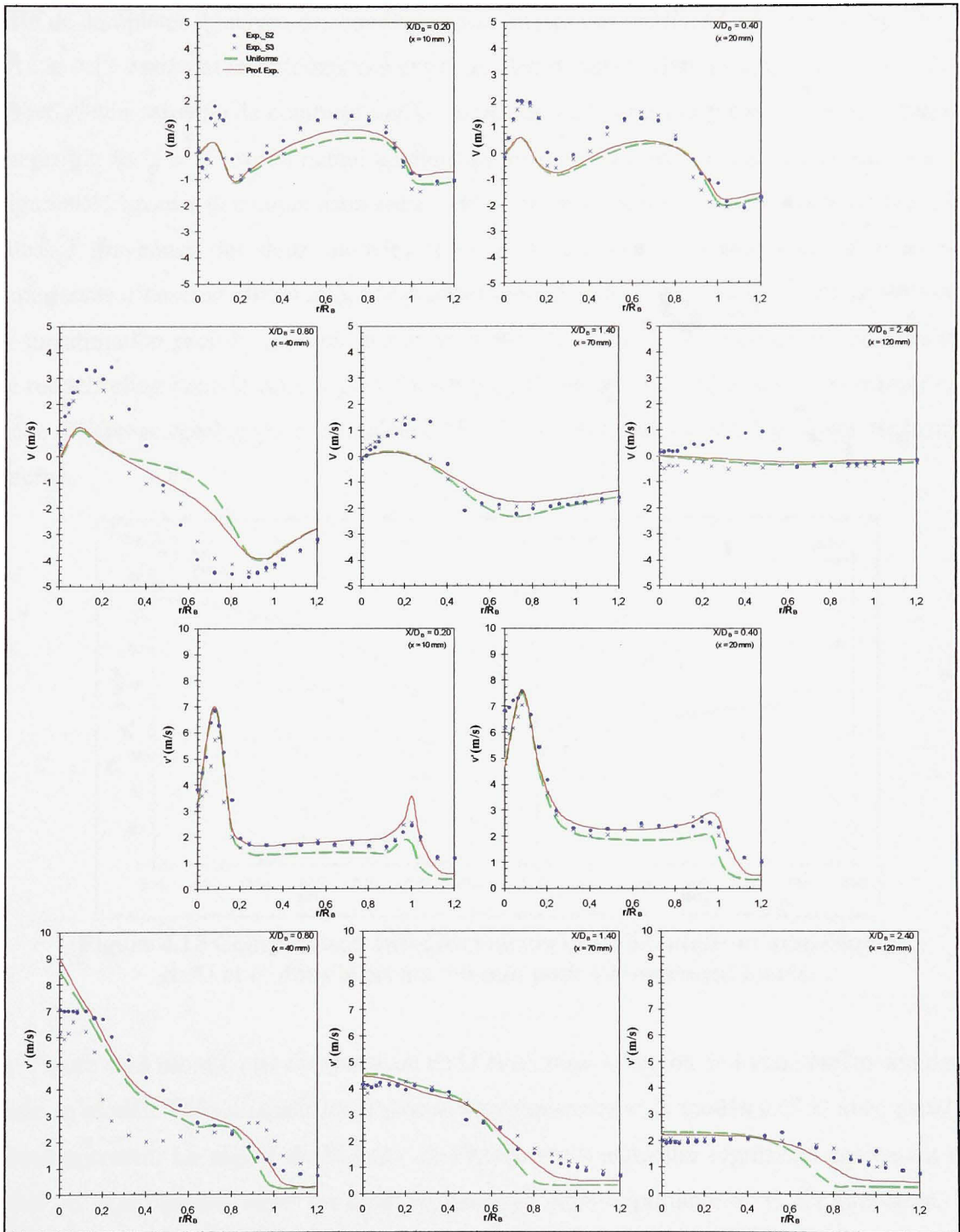


Figure 4.11 Comparaison entre les valeurs expérimentales et numériques de V et v' pour l'étude comparative des conditions aux frontières de l'écoulement à froid.

Afin de compléter l'analyse des conditions aux limites des modèles CFU et CFE, les Figures 4.12 et 4.13 montrent les vitesses moyennes axiales et leurs variations respectives aux entrées effectives du domaine de combustion ($X = 0$ mm). Ces figures ont pour objectif de comparer les profils de U et u' expérimental appliqué au modèle CFE avec celui du modèle CFU. La Figure 4.12 montre la comparaison entre U et u' du jet avec les données expérimentales. Les vitesses moyennes des deux modèles (CFE et CFU) sont similaires entre elles et sont supérieures d'environ 10% aux données expérimentales sur l'axe central. L'augmentation de la surestimation près de la paroi interne du jet ($R/R_B = 0.072$) semble montrer un problème de modélisation près de cette région. Similairement à la Figure 4.6, u' est sous-estimée et la seule différence notable entre le modèle CFE et CFU est également dans la région de la paroi interne.

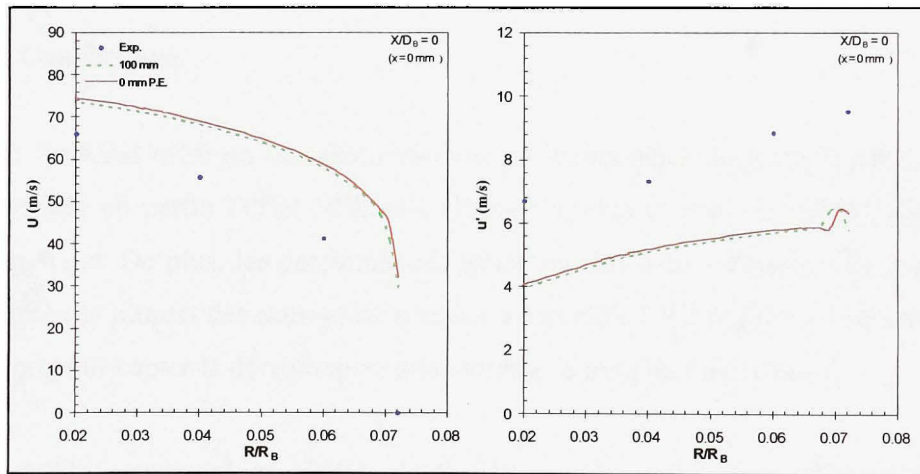


Figure 4.12 Comparaison entre les valeurs expérimentales et numériques de U et u' dans le jet à $x = 0$ mm pour l'écoulement inerte.

La Figure 4.13 montre une comparaison de U et u' , pour la région de l'écoulement annulaire, entre le modèle CFE utilisant les données expérimentales et le modèles CFU avec canal de développement. La région de la paroi de l'écoulement annulaire représente également une zone où la différence entre les deux modèles est plus importante et U est surestimé. Un raffinement du maillage près des parois (jet et écoulement annulaire) pourrait potentiellement améliorer les prédictions de cette région.

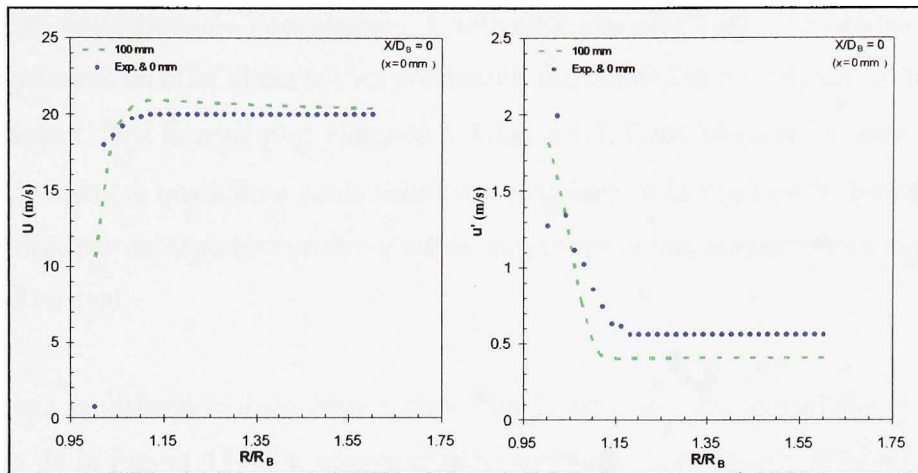


Figure 4.13 Comparaison entre les valeurs expérimentales et numériques de U et u' dans le jet à $x = 0$ mm pour l'écoulement inerte.

4.5 Conclusions

Le modèle EARSM offre un bon compromis entre les modèles du premier et second ordre afin de corriger en partie l'effet "diffusif" (Papageorgakis et Assanis (1999)) associé à k -epsilon classique. De plus, les performances générales des deux catégories de modèles sont similaires pour la plupart des stations de mesure. Le modèle LRR montre toutefois une mince amélioration pour capter la décroissance de la vitesse le long de l'axe central.

Malgré la faible supériorité du modèle de deuxième ordre, celui-ci ne sera pas choisi pour l'écoulement réactif. En effet, la quantité de noeuds supplémentaires exigés par celui-ci, en plus de la résolution d'équations différentielles supplémentaires pour le transport du tenseur des contraintes de Reynolds, rend ce modèle plus difficile à résoudre numériquement. Ces dernières considérations ne tiennent pas compte du fait que l'écoulement réactif contient également d'autres équations supplémentaires à résoudre pour traiter la combustion. En comparant les résultats et la robustesse du modèle EARSM avec les minces gains apportés par le modèle LRR, il ne semble pas avantageux ici d'utiliser des modèles DRSM

Afin d'améliorer la description des conditions aux limites créées par le canal annulaire, la soustraction de cette région et l'ajout de profils expérimentaux ont aidé significativement à

améliorer les prédictions de l'écoulement. L'influence des conditions aux limites annulaires ont non seulement un effet direct sur les prédictions des zones de recirculation et de mélange, mais également dans la zone plus éloignée à $X/D_B \geq 1.8$. Cette observation peut également être faite de manière qualitative sur le tourbillon extérieur de la Figure 4.9. Numériquement cela se traduit par un abaissement des vitesses moyennes et une augmentation des quantités turbulentes en aval.

Comme cette modification a un impact direct sur la structure des tourbillons et des zones turbulentes de la Figure 4.9, elle sera également appliquée et comparée avec les CFU pour l'écoulement réactif. Ainsi, il sera possible de mieux décrire le mélange turbulent qui caractérise tout particulièrement la combustion turbulente non prémélangée.

La comparaison des profils de U et u' à $X = 0$ mm, dans le jet et l'écoulement annulaire, ont également permis d'illustrer que la différence la plus importante entre les modèles CFE et CFU se situent près des parois. Comme la description de l'écoulement près de la paroi est lié à la représentation des zones de cisaillement et aux zones de re-circulation par le même fait, une étude plus approfondie de la paroi (raffinement du maillage, loi de paroi) pourrait permettre de voir l'influence réelle de ce paramètre sur les prédictions du champs de vitesse.

Afin de résumer toutes les simulations numériques qui ont été effectuées avec l'écoulement inerte air-air, les Tableaux 4.1 et 4.2 présentent les diverses configurations, modèles et conditions aux limites utilisées.

Tableau 4.1 Sommaire des simulations effectuées pour les cas non réactifs avec canal de développement annulaire

Modèles de turbulence	Intensité turb. annulaire	Temp. ouverture latérale (K)
k-epsilon	2%, 5%, 10%	300, 1000, 1500
k-epsilon mod. Dally et al. (1998a)	5%	300
k-omega	5%	300
SST	5%	300
EARSM	5%	300
LRR	5%	300
BM-M1	5%	300
BM-M2	5%	300
SSG	5%	300

*Ces cas ont été modélisés avec le maillage intermédiaire de 361 000 noeuds

Tableau 4.2 Sommaire des simulations effectuées pour les cas non réactifs sans canal de développement annulaire avec CFE et CFU

Modèles de turbulence	Intensité turb. annulaire	Temp. ouverture latérale (K)
EARSM	5%	300

CHAPITRE 5

PRÉSENTATION DES RÉSULTATS RÉACTIFS

Les conditions aux limites ainsi que le modèle de turbulence ont une importance majeure sur la prédiction du champ de vitesse inerte. Le présent chapitre se concentrera sur l'effet des conditions aux limites de l'écoulement annulaire sur les prédictions de l'écoulement réactif, et ce, en utilisant le modèle EARSM avec le maillage de 361 000 éléments. Ainsi, en fonction de la longueur du canal annulaire ainsi que des conditions aux limites annulaires utilisées, le champ de vitesse ainsi que les principales variables scalaires de l'écoulement réactif seront analysés pour tenter de trouver la meilleure configuration géométrique du modèle. Avant d'entrer dans l'analyse proprement dite des résultats réactifs, les divers paramètres de création de la bibliothèque de flamme seront présentés.

5.1 Bibliothèque de flamme

La modélisation des réactions chimiques de ce mémoire a été faite en utilisant une hypothèse de régime de combustion flammelette. Le mécanisme de cinétique chimique utilisé pour construire cette bibliothèque de flamme est celui de Peters (1993) et contient 64 espèces et 752 réactions et est dénommé C1C4. Ce mécanisme a été utilisé, car il est le seul (fournit avec le logiciel CFX-RIF) permettant un mélange de carburants différents. Le carburant utilisé dans l'expérimentation de Dally et al. (1998a) est un mélange composé de 50% de méthane (CH_4) et 50% d'hydrogène (H_2) par volume. Cette répartition volumique correspond alors au fraction massique de 0.89 et 0.11 pour le CH_4 et le H_2 respectivement. Le rapport des diffusions thermiques et moléculaires, nombre de Lewis, de chacune des espèces a été établi à 1, tel que suggéré par Hossain et Malalasekera (2003). Avec ce choix, l'hypothèse est que la diffusion des espèces chimiques dans l'écoulement réactif se fait au même rythme que la conduction de chaleur. La plage de taux de dissipation scalaire nécessaire, afin de couvrir tous les éléments de flamme jusqu'à l'extinction, comprend dix valeurs réparties de manière logarithme entre 0 et 92 s^{-1} . Les fractions de mélange (Z) utilisées, pour résoudre les

équations de flammes laminaires des dix valeurs de $\tilde{\chi}$ pré-établies, sont distribuées uniformément avec 20 valeurs distribuées entre 0 et 1. Finalement, la bibliothèque a été calculée avec l'oxydant et le carburant à 300 K.

5.2 Champs de vectoriel

Tel qu'il a pu être observé dans le précédent chapitre, l'imposition des conditions aux limites expérimentales (CFE) annulaires pour les vitesses et l'énergie turbulente moyenne, a amélioré de manière significative les prédictions du champ vectoriel de vitesse. Comme la combustion et la turbulence ont une influence mutuelle directe, il est également important de valider dans le cas réactif, les conséquences de l'application des CFE sur les prédictions de l'écoulement. L'effet de la longueur de développement du canal annulaire sera également validé, mais en imposant cette fois-ci des conditions aux limites uniformes (CFU) pour l'écoulement annulaire. Le but de cet exercice est de valider quelle longueur annulaire de développement serait la plus appropriée pour définir l'écoulement et améliorer les prédictions.

Le champ de vitesse présenté ici est celui du cas réactif HM1 de Dally et al. (1998b). Les Figure 5.1 et 5.2 présentent l'influence des conditions du canal d'entrée annulaire sur les composantes axiales et radiales de l'écoulement suivi de leurs variations respectives. La simulation utilisant les CFE et n'incluant pas de canal annulaire de développement est tracée en ligne pleine, alors que les courbes en lignes coupées, pointillées et ligne d'axe représentent respectivement les canaux annulaires de 25, 50 et 100 mm de longueur. Les prédictions des vitesses moyennes axiales sont bonnes jusqu'à une distance d'environ 45 mm de la face du brûleur. Les problèmes de surestimation de U dans la région de la face du brûleur ainsi que de la sous-estimation le long de l'axe central pour $X/D_B \geq 1.3$ sont similaires à ceux du cas inerte. La zone de fort cisaillement centrale demeure une région difficile à prédire numériquement. Ainsi, une décroissance de U supérieure aux mesures expérimentales entre $0 \leq R/R_B \leq 0.4$ et une surestimation de u' le long de l'axe central peuvent être observées. Pour les composantes radiales de l'écoulement, les prédictions sont

valides uniquement à la première station et se détériorent en aval. Similairement au comportement axial, V est généralement sous-estimée alors que v' est surestimée. Les fluctuations de vitesses généralement surestimées dans les deux directions semblent montrer que les modèles numériques diffusent trop fortement l'énergie cinétique turbulente.

Même si les prédictions semblent moins bonnes dans la direction radiale, le module de la vitesse est très inférieur dans cette direction et l'erreur de mesure expérimentale apporte une plus grande incertitude de cette composante. Les mesures ayant été prises avec un système PIV (Particules Image velocimetry), Dally et al. (1998a) estiment que l'erreur, dû à la présence de plus d'une particule dans le volume de mesure, est de 4% pour les vitesses moyennes et de 7% pour leurs fluctuations. En tenant compte de cette marge d'erreur,

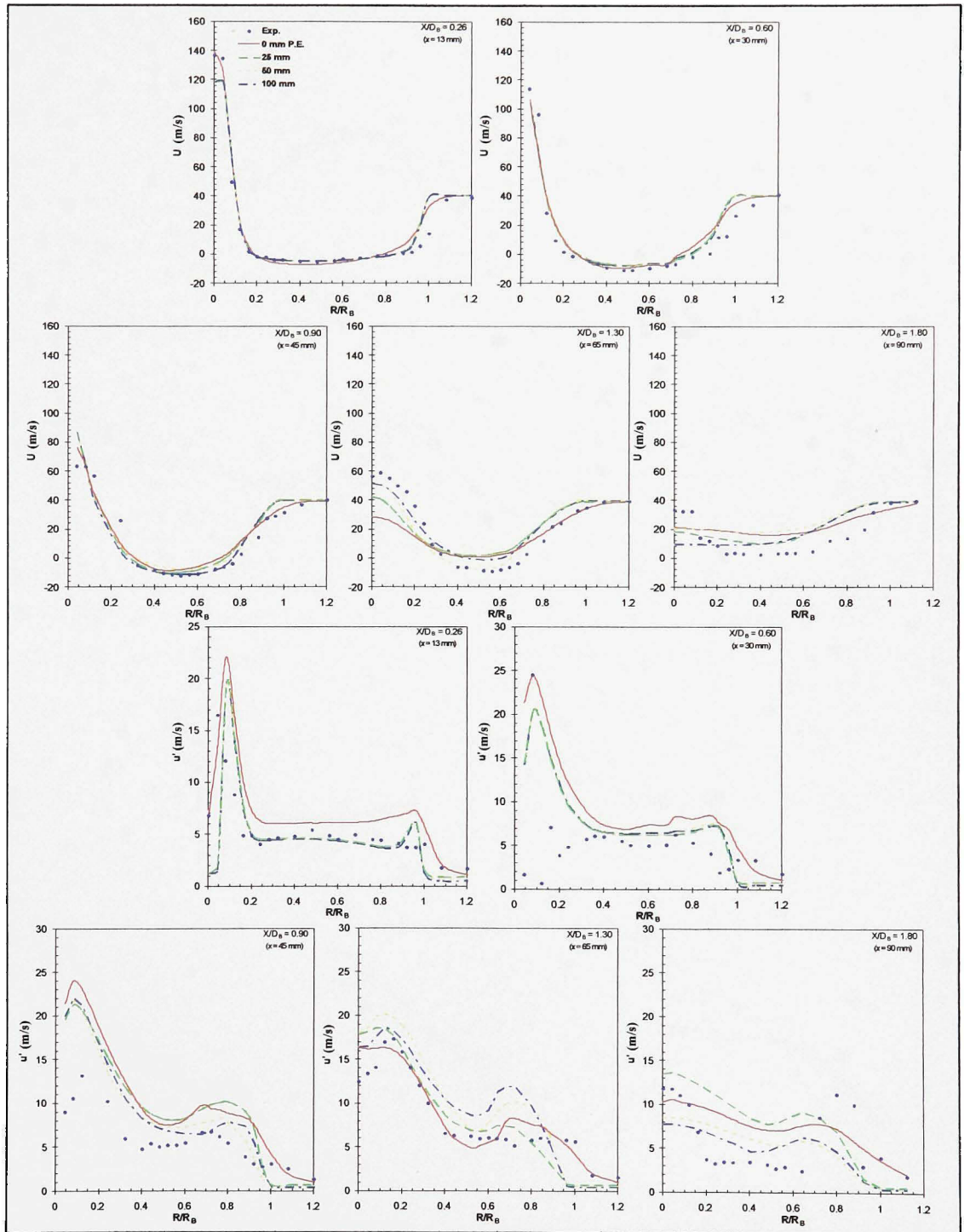


Figure 5.1 Comparaison entre les valeurs expérimentales et numériques de U et u' , en fonction de différentes longueurs de canaux annulaires, pour l'étude du champ vectoriel de l'écoulement réactif HM1.

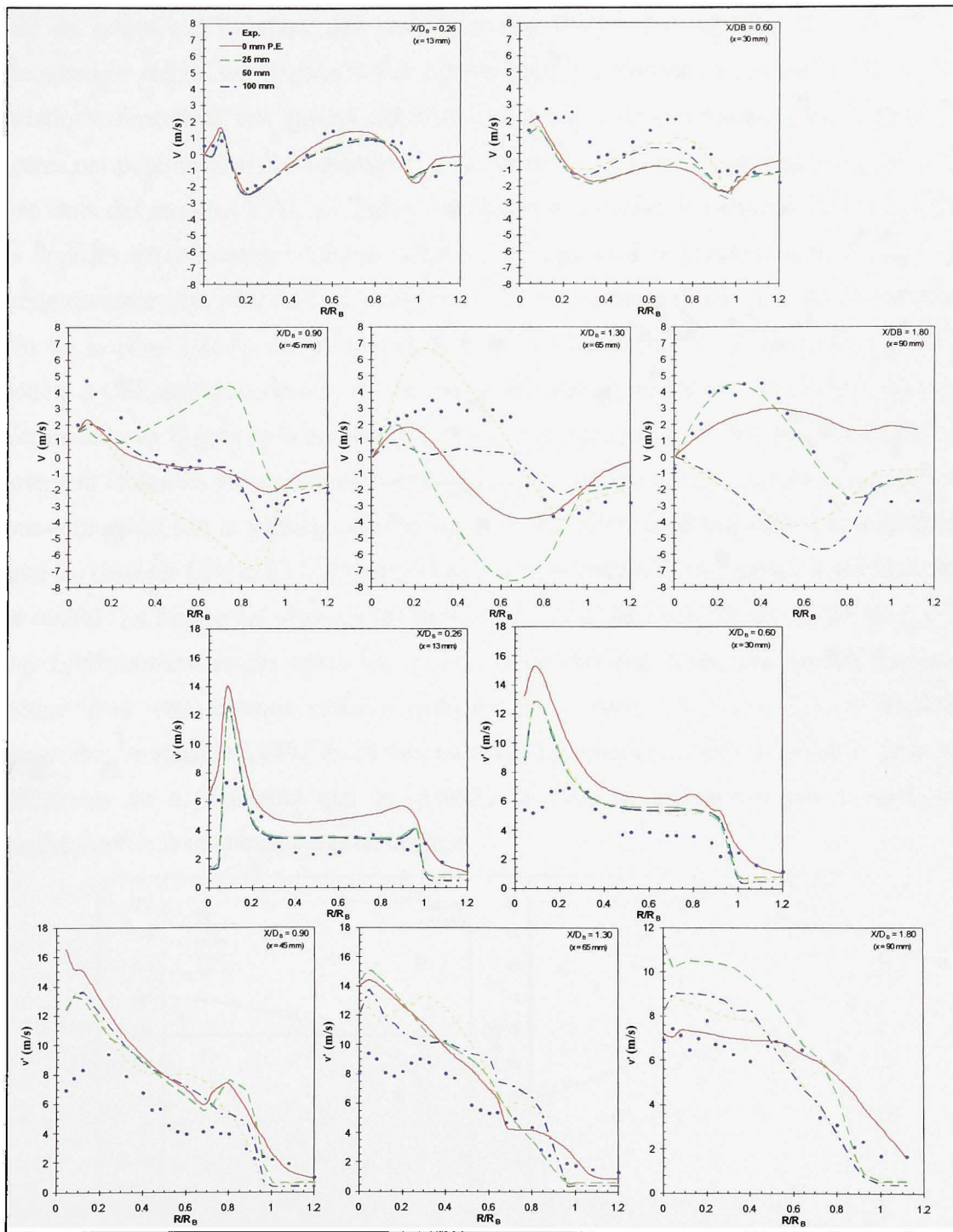


Figure 5.2 Comparaison entre les valeurs expérimentales et numériques de V et v' , en fonction de différentes longueurs de canaux annulaires, pour l'étude du champ vectoriel de l'écoulement réactif HM1.

Afin de compléter l'analyse des conditions aux limites des modèles CFU et CFE de l'écoulement réactif, les Figures 5.3 et 5.4 montrent les vitesses moyennes axiales et leurs variations respectives aux entrées effectives du domaine de combustion ($X = 0$ mm). Ces figures ont pour objectif de comparer le profil d'entrée de U et u' appliqué au modèle CFE avec ceux des modèles CFU. La Figure 5.3 montre la comparaison entre U et u' du jet avec les données expérimentales dans la région du jet central. Les prédictions de U et u' sont similaires entre elles pour tous les modèles à CFU et une mince différence peut-être observée près de la paroi interne du jet central ($R/R_B = 0.072$). Même si les prédictions de U du modèle à CFE sont surestimées, ce dernier modèle réussit mieux que les autres à décrire la décroissance de U près de la paroi du jet. Pour les prédictions de u' , les modèles à CFU sont fortement éloignées des données expérimentales. Le modèle à CFE, malgré une importante sous-estimation, suit la tendance à la hausse de u' des points expérimentaux. Cette différence entre les modèles CFE et CFU démontre l'impact des conditions aux limites annulaires sur le jet central. La Figure 5.4 présente les profils de U et u' de l'écoulement annulaire à $x = 0$ mm. Similairement au cas inerte, les prédictions des modèles demeurent essentiellement les mêmes pour une distance radiales éloignée de la paroi. Pour les régions annulaires concernées, le modèle à CFU de 25 mm est celui qui réussit le mieux à prédire U et u' . Les prédictions de u , démontre que les modèles à CFU ne réussissent pas à capturer le cisaillement de l'écoulement près de la paroi.

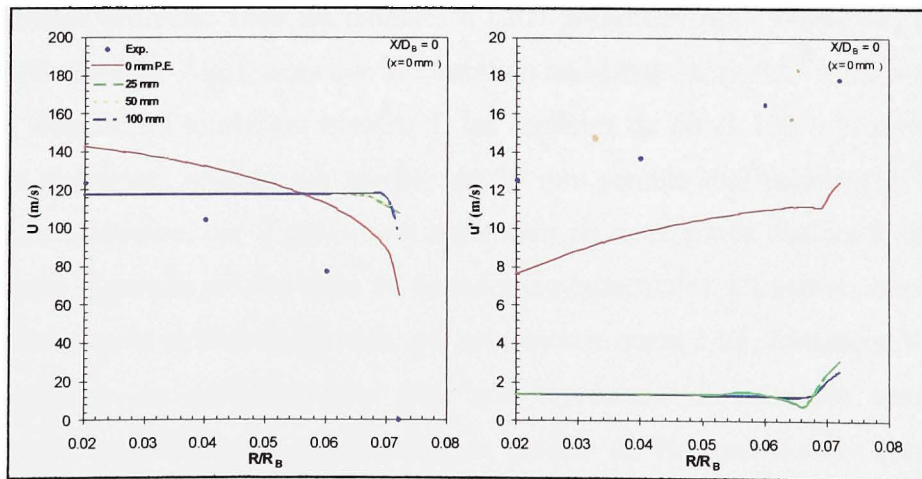


Figure 5.3 Comparaison entre les valeurs expérimentales et numériques de U et u' dans le jet à $x = 0$ mm pour l'écoulement réactif.

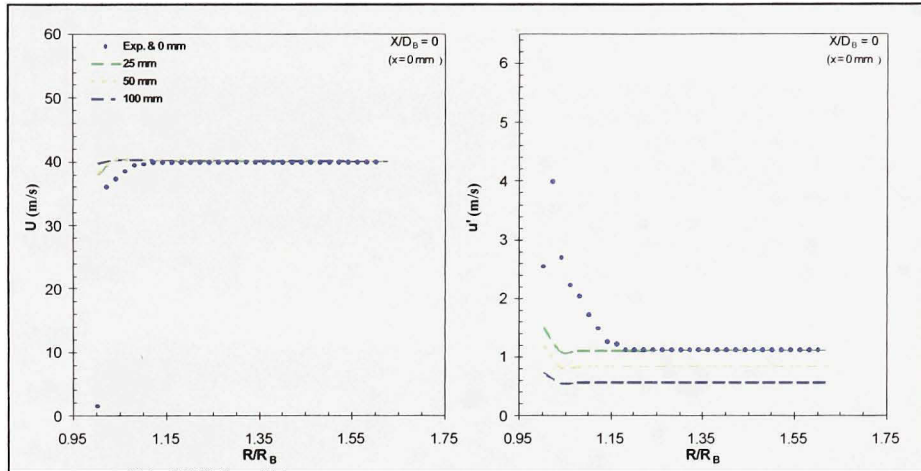


Figure 5.4 Comparaison entre les valeurs expérimentales et numériques de U et u' de l'écoulement annulaire à $x = 0$ mm pour l'écoulement réactif.

En ce qui concerne l'influence de la longueur du canal d'entrée annulaire, tous les modèles étudiés ici semblent essentiellement avoir le même comportement jusqu'à $X/D_B = 0.6$. En effet, tel qu'observé sur la Figure 5.5, présentant les lignes de courant des diverses longueurs de développement utilisées, les dimensions radiales des tourbillons sont très similaires pour $X/D_B \leq 0.6$. La différence entre les modèles commence à se distinguer plus clairement à partir de $X/D_B = 0.9$. En effet, à mesure que la longueur de développement du canal annulaire augmente, le tourbillon extérieur 1 (tel que présenté à la Figure 5.5) semble se diviser en deux tourbillons distincts. Tous les modèles à CFU présentent trois tourbillons distincts et répartis différemment. Ainsi, alors que le tourbillon numéro 3 du modèle de 25 mm semble à peine être détaché du tourbillon numéro 1, les modèles de 50 et 100 mm présentent des tourbillons clairement séparés. Le modèle de 25 mm semble mal représenter la zone de recirculation extérieure, car il prédit une séparation en deux zones distinctes alors que ce comportement n'est pas présent dans les données expérimentales. La même conclusion peut être apportée avec le modèle de 50 mm, qui sous-estime quant à lui, fortement V . Ces deux derniers modèles ne semblent donc pas bien représenter la structure tourbillonnaire expérimentale. La présence du tourbillon 3 du modèle de 100 mm semble aussi créer un problème dans la prédiction de la composante V à partir de $X/D_B = 1.3$. En effet, les composantes U et V de ce modèle montrent une zone de vitesse très lente, localisée

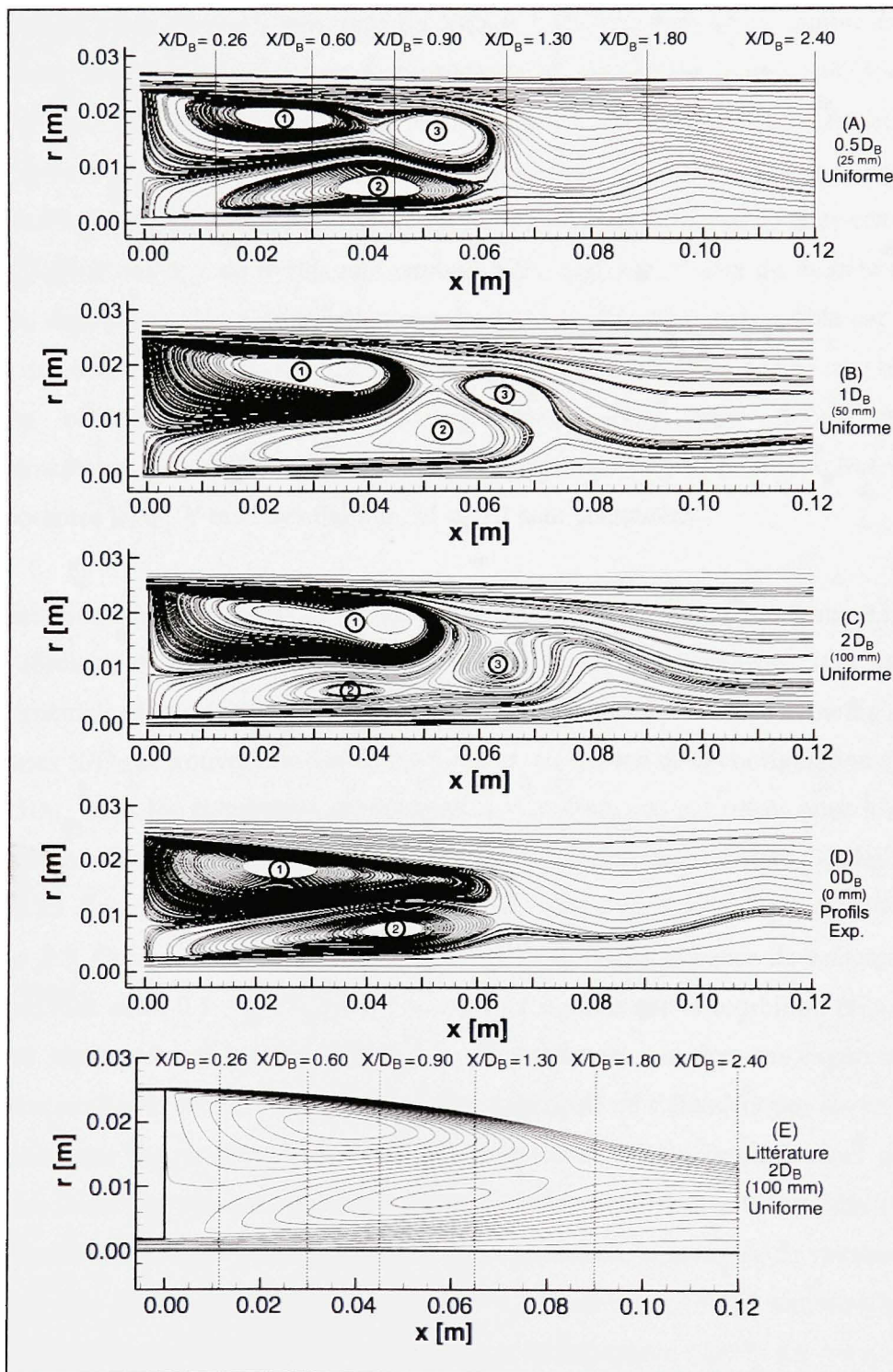


Figure 5.5 Comparaison des lignes de courant de pour différentes longueurs de canaux annulaires avec les résultats numériques de Odedra et Malalasekera (2007) pour l'écoulement réactif HM1.

radialement entre 10 et 15 mm, près de $X/D_B = 1.3$. Cette région qui semble être l'œil du tourbillon numéro 3 est également perceptible sur les lignes de courant verticales du modèle de 100 mm. Contrairement aux autres, le modèle à CFE est le seul à prédire deux zones de recirculation se rapprochant des résultats numériques de la littérature obtenue par Odedra et Malalasekera (2007). Même s'ils sont plus courts d'environ 20% que ceux de ces auteurs, les tourbillons du modèle de 0 mm sont environ 13% supérieur à ceux du modèle de 100 mm dans la direction axiale. Le tourbillon numéro 1 du modèle de 0 mm semble par contre plus étroit que ceux des modèles CFU. Malgré une meilleure ressemblance avec les prédictions de Odedra et Malalasekera (2007), qui elles-mêmes sont assez fidèles aux valeurs expérimentales, le modèle à CFE n'est pas réellement supérieur aux autres lorsque les composantes U , u' , V et v' des Figures 5.1 et 5.2 sont comparées.

À défaut de pouvoir présenter les lignes de courant expérimentales de la flamme HM1 suite à une absence de données expérimentales, la Figure 5.6 présente une comparaison expérimentale et numérique des vecteurs de vitesse tracés à différentes hauteurs axiales. Les distances X/D_B se trouvent au-dessus des vecteurs de vitesse de la configuration géométrique de $0.5D_B$. Dans les simulations numériques, les vecteurs ont été tracés pour les modèles à CFU, le modèle CFE et le modèle de Odedra et Malalasekera (2007). Similairement aux lignes de courant, tous les modèles numériques donnent des résultats similaires jusqu'à $X/D_B = 0.9$. Comme les résultats expérimentaux montrent la présence de vecteurs de vitesse presque nuls entre $0.1 \leq r \leq 0.2$ à $x = 9$ cm, cela signifie que le tourbillon principal central s'étend minimalement jusqu'à $X/D_B = 1.8$. Contrairement aux données expérimentales, les vecteurs similaires (ou de sens opposé au flux principal) ne s'étendent pas au-delà de $X/D_B = 1.3$ pour tous les modèles numériques de ce mémoire. Cela confirme alors que tous les modèles utilisés ne réussissent pas à bien prédire la longueur du tourbillon principal extérieur de l'écoulement réactif. Selon les données expérimentales, la présence de vecteurs de vitesse opposés pour les stations $X/D_B = 1.3$ et $X/D_B = 1.8$ entre $0.1 \leq r \leq 0.2$ semblent indiquer une zone d'arrêt tel que celle obtenue par Odedra et Malalasekera (2007) à $x \approx 82.5$ mm sur la Figure 5.5 E.

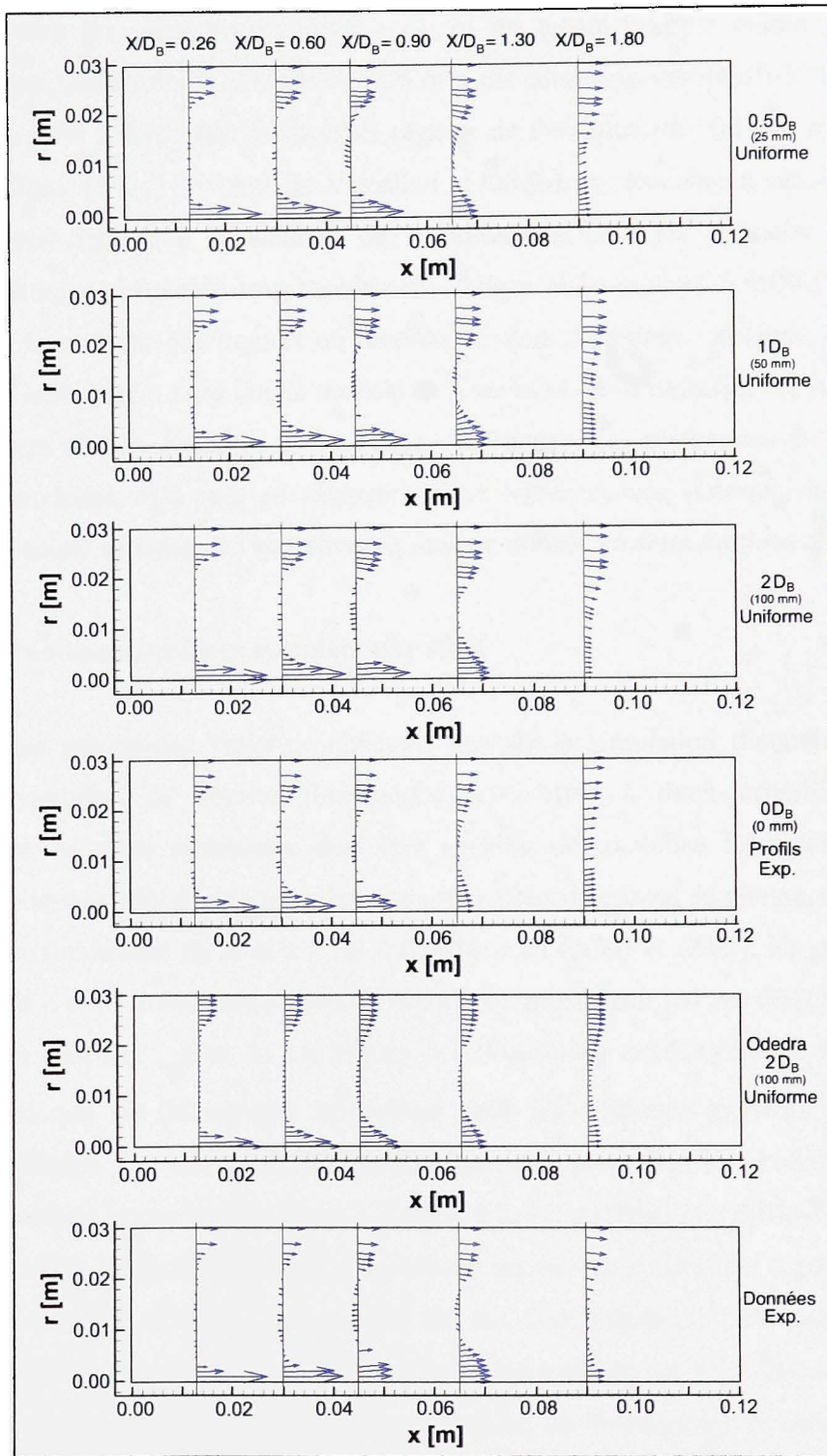


Figure 5.6 Comparaison entre les vecteurs de vitesse expérimentaux et numériques en fonction des différentes longueurs de canaux annulaires.

À travers toutes les géométries utilisées ici, et en tenant compte autant des résultats quantitatifs que qualitatifs, le modèle de 100 mm est celui qui semble offrir les meilleures performances pour représenter les diverses régions de l'écoulement. Tel que mentionné par MCGuirk et Rodi (1977) les modèles k-epsilon et DRSM ont tendance à surestimer le taux de décroissance ainsi que l'étalement des écoulements avec jet circulaire en diffusant l'énergie cinétique turbulente trop rapidement. Même si le modèle EARSM apporte une amélioration importante par rapport au modèle de deux équations classique, il ne semble toutefois pas aussi performant que le modèle de deuxième ordre classique utilisé par Odedra et Malalasekera (2007). En effet si le transport du tenseur des contraintes de Reynolds est moins bien modélisé, cela pourrait expliquer, entre autres choses, pourquoi la longueur du tourbillon principal extérieur est soit sous-estimée ou divisée en deux sections différentes.

5.3 Grandeurs scalaires calculées par CFX

La qualité des prédictions scalaires obtenues lors de la simulation d'écoulement réactif utilisant l'hypothèse de régime flammelette, est reliée à deux critères importants. Premièrement, le code numérique doit être capable de modéliser l'écoulement le plus exactement possible, afin d'obtenir de bonnes prédictions du champ de vitesse, des grandeurs turbulentes et finalement de Z et z' . Tel qu'indiqué en (2.56) et (2.65), les prédictions du scalaire passif Z et sa fluctuation z' sont de première importance, car ces deux variables sont utilisées pour calculer $\tilde{\chi}$ et T . La Figure 5.7 illustre les prédictions de la fraction de mélange ainsi que les fluctuations respectives pour les différents modèles de conditions annulaires utilisées. De nouveaux, les prédictions de Z pour tous les modèles demeurent similaires et relativement bonnes jusqu'à $X/D_B = 0.9$. Le problème de diffusivité turbulente rencontrée dans la prédiction du champ de vitesse est encore perceptible à partir de $X/D_B = 1.3$. À partir de cette distance, les modèles ont des comportements différents les uns des autres. La prédiction du scalaire passif étant entre autre dictée par la diffusion de l'énergie cinétique au travers la viscosité turbulente (hypothèse de Boussinesq), si cette dernière est surestimée, il est alors possible que Z soit diffusé trop fortement et sous-estime les mesures expérimentales.

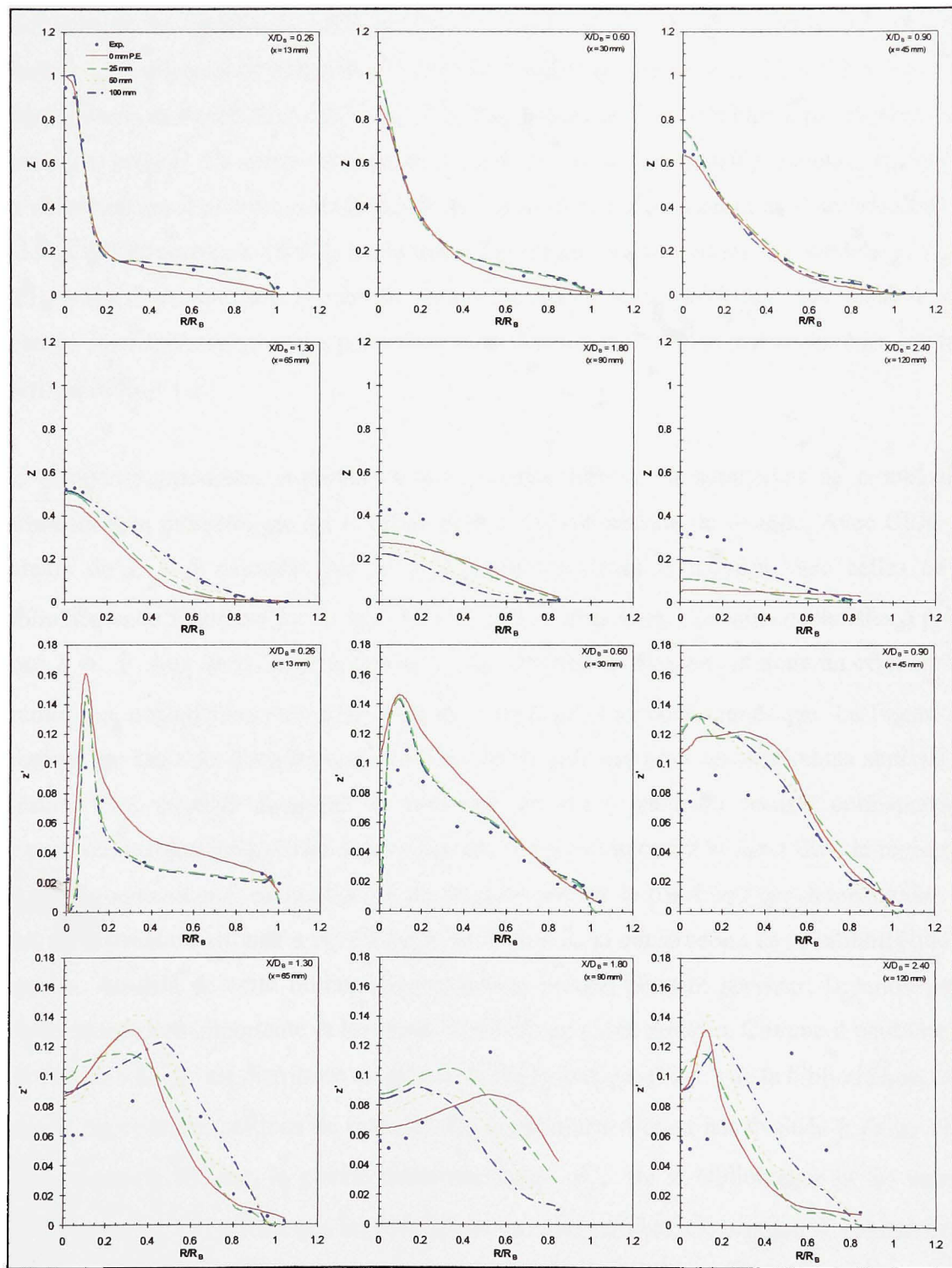


Figure 5.7 Comparaison entre les valeurs expérimentales et numériques de Z et Z' , en fonction de différentes longueurs de canaux annulaires, pour l'étude du champ scalaire de l'écoulement réactif HM1.

Globalement, le modèle de 100 mm est qui celui semble fournir le profil de condition d'entrée le meilleur pour transporter Z dans le domaine de calcul pour $X/D_B \leq 1.3$. Pour des distances axiales supérieures à $X/D_B = 1.3$ la distribution de z' semble être déplacée vers l'axe central du brûleur. Ce comportement de la variance du scalaire passif s'explique également en observant les structures turbulentes de la Figure 5.5. En comparant avec les résultats de Odedra et Malalasekera (2007), les largeurs des zones des tourbillons des modèles CFU et CFE utilisés, transportant z' vers la région annulaire, sont inférieures aux résultats des auteurs. Conséquemment, il est possible que le transport radial de z' soit moins bien prédit à partir de $X/D_B = 1.3$.

Le deuxième paramètre important à tenir compte lors de la simulation de combustion turbulente non prémélangée est la génération de la bibliothèque de flamme. Avec CFX, les valeurs de Z et $\tilde{\chi}$ calculées par le code numérique sont comparées avec celles de la bibliothèque de flamme pour en déduire les espèces chimiques. Les valeurs choisies a priori pour Z et $\tilde{\chi}$ lors de la construction de la bibliothèque de flamme ont donc un effet sur les prédictions, puisqu'elles servent de base de comparaison au code numérique. La Figure 5.8 présente les taux de dissipation du scalaire passif calculés pour les différentes stations de mesure. Ces courbes montrent la présence de deux sommets locaux correspondant respectivement aux deux zones de cisaillement. Le plus important se situe dans la région du jet alors que le second, moins intense, est localisé près de la paroi de l'écoulement axial. Le taux de dissipation critique a été évalué à 92 s^{-1} lors de la construction de la bibliothèque de flamme. Au-delà de cette limite, des extinctions locales peuvent survenir, la température baisse de manière importante et les réactions chimiques sont arrêtées. Comme il peut être vu à la Figure 5.8, $\tilde{\chi}$ est distribuée au-delà de la limite critique (92 s^{-1}) de la bibliothèque, et ce pour la majorité des stations de mesures. La température n'étant pas évaluée à l'aide de la bibliothèque de flamme, la grande différence entre $\tilde{\chi}_{cr}$ de la bibliothèque et les valeurs calculées par CFX n'affecte pas les prédictions de cette variable. Ce manque de cohérence de $\tilde{\chi}$ entre les valeurs établies pour la construction de la bibliothèque de flamme et celles calculées par CFX affectera plutôt la prédiction des espèces chimiques. Dû à l'utilisation d'un canal d'entrée de carburant similaire pour tous les modèles ainsi qu'à un comportement

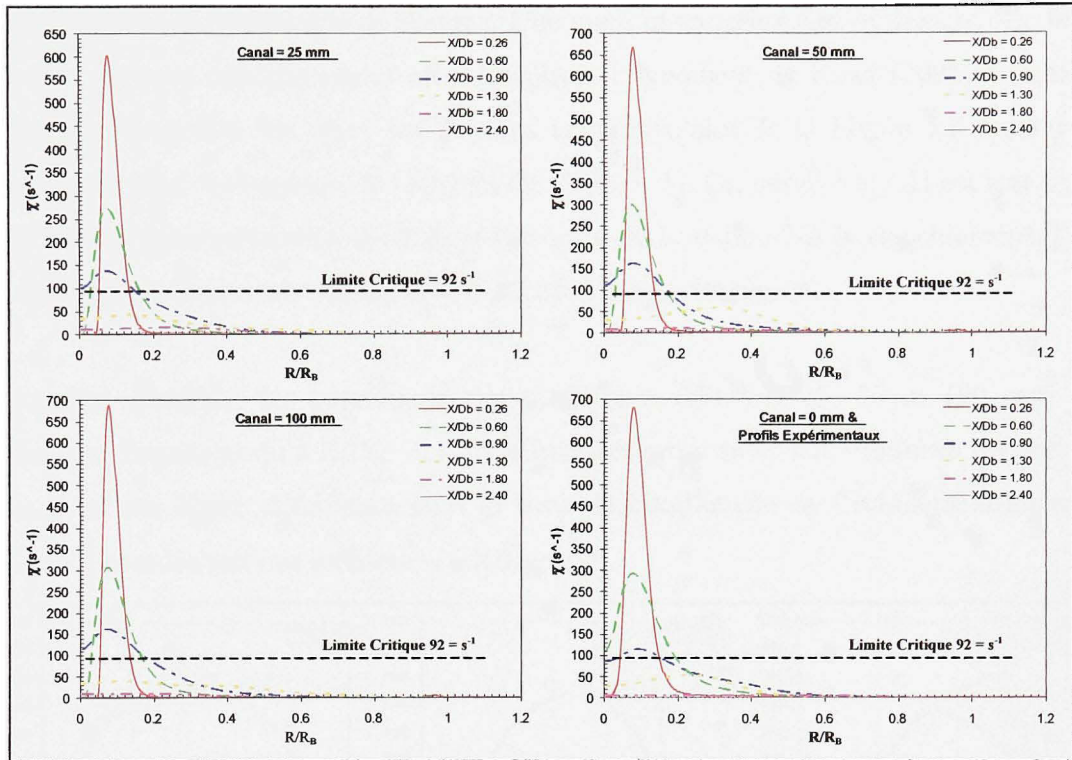


Figure 5.8 Comparaison numérique de $\tilde{\chi}$, en fonction de différentes longueurs de canaux annulaires et hauteurs axiales.

majoritairement axial de l'écoulement dicté par le jet de carburant (zone de cisaillement axial similaire), le taux de dissipation du scalaire passif demeure essentiellement le même pour tous les modèles. La Figure 5.9 présente les profils de températures obtenus à l'aide des différents modèles utilisés. Alors que les températures mesurées à $X/D_B = 0.26$ demeurent aux alentours de 1650 K au travers du tourbillon principal extérieur, les calculs numériques montrent une légère augmentation en s'approchant de la paroi de l'écoulement annulaire. Cette tendance a également été observée par Ravikanti et al. (2009). Dally et al. (1998a) suggèrent que ces températures expérimentales plus basses soient causées par l'extinction locale dû au cisaillement de l'écoulement dans cette région alors que Kuan (2005) suggère plutôt que la sonde expérimentale n'était peut-être pas adéquate pour mesurer la frontière externe du tourbillon extérieur. Même si le taux de dissipation du scalaire passif n'a pas été mesuré expérimentalement, les résultats numériques de la Figure 5.6 montre que près de la paroi de l'écoulement annulaire ($R/R_B = 1$), $\tilde{\chi}$ est bien en dessous de la limite critique

pouvant amener de l'instabilité de flamme. Une autre observation peut également être faite à partir des données expérimentales afin d'appuyer l'hypothèse de Kuan (2005) concernant l'erreur expérimentale. En effet, les données expérimentales de la Figure 5.9 montrent une augmentation de concentration de OH près de ($R/R_B = 1$). Or, comme le OH est une espèce qui se produit plus particulièrement dans la région de la flamme (à la stoechiométrie), une augmentation de température pourrait être attendue dans cette région.

De manière générale, les prédictions des modèles à CFU de 25, 50 et 100 mm sont relativement bonnes jusqu'à $X/D_B = 1.3$. Ils offrent des prédictions très similaires les uns aux autres avec une légère défaillance dans la zone de cisaillement de l'écoulement annulaire ($R/R_B \approx 1$) pour les stations inférieures à $X/D_B = 0.9$.

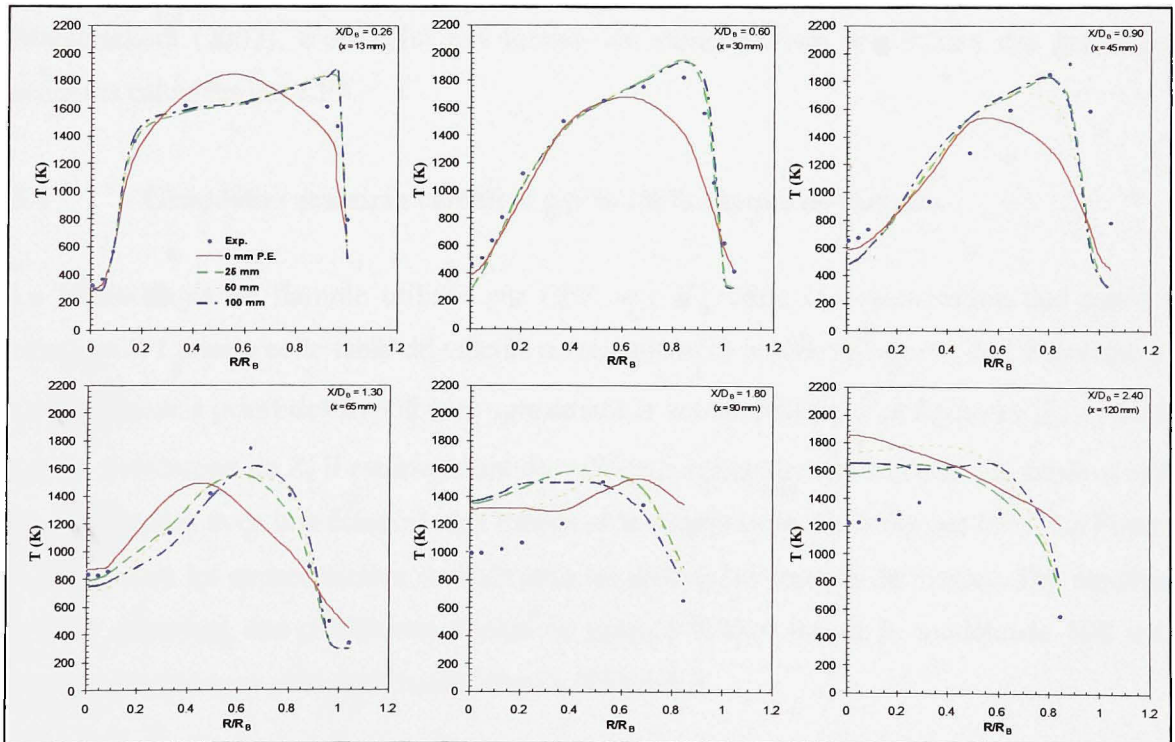


Figure 5.9 Comparaison entre les valeurs expérimentales et numériques de température, en fonction de différentes longueurs de canaux annulaires, pour l'étude du champ scalaire de l'écoulement réactif HM1.

À partir de $X/D_B = 1.3$, la surestimation de la température le long de l'axe central, pourrait de nouveau être dû à l'erreur de prédictions de k et ϵ dans cette même région. En effet CFX ne déduit pas la température à partir de la bibliothèque de flamme (elle-même indépendante des grandeurs turbulentes), mais plutôt avec l'équation d'énergie (2.12) et l'équation de température (2.80). Comme cette dernière est influencée par k et ϵ au travers de la modélisation de $\tilde{\chi}$, les grandeurs turbulentes ont une influence directe sur la température calculée. Ainsi, la surestimation des températures à partir de $X/D_B = 1.8$ pourrait être reliée aux moins bonnes prédictions des fluctuations de vitesse pour les stations plus en aval. Cette surestimation générale de la température a également été observée par Ravikanti et al. (2009) lors de l'utilisation du mécanisme chimique de Peters (1993). Finalement, même si le modèle à CFE était celui qui se rapprochait le plus à la structure turbulente de Odedra et Malalasekera (2007), c'est celui qui fournit les moins bonnes prédictions des grandeurs scalaires calculées par CFX.

5.4 Grandeurs scalaires calculées par la bibliothèque de flamme.

La bibliothèque de flamme utilisée par CFX sert à prédire la concentration des espèces chimiques. Comme cette table de valeurs a été construite indépendamment de l'écoulement, en établissant à priori des hypothèses concernant la valeur critique d'extinction ($\tilde{\chi}_{cr}$) ainsi que la distribution de Z , il est important de valider la concentration de certaines espèces afin de faire un lien avec la mécanique des fluides et le transport de Z calculé par CFX. La Figure 5.10 présente les concentrations de H_2O pour les différentes stations de mesure. Les modèles à CFU apportent des prédictions similaires jusqu'à $X/D_B = 0.9$ et le modèle de 100 mm demeure légèrement plus performant jusqu'à $X/D_B = 1.3$.

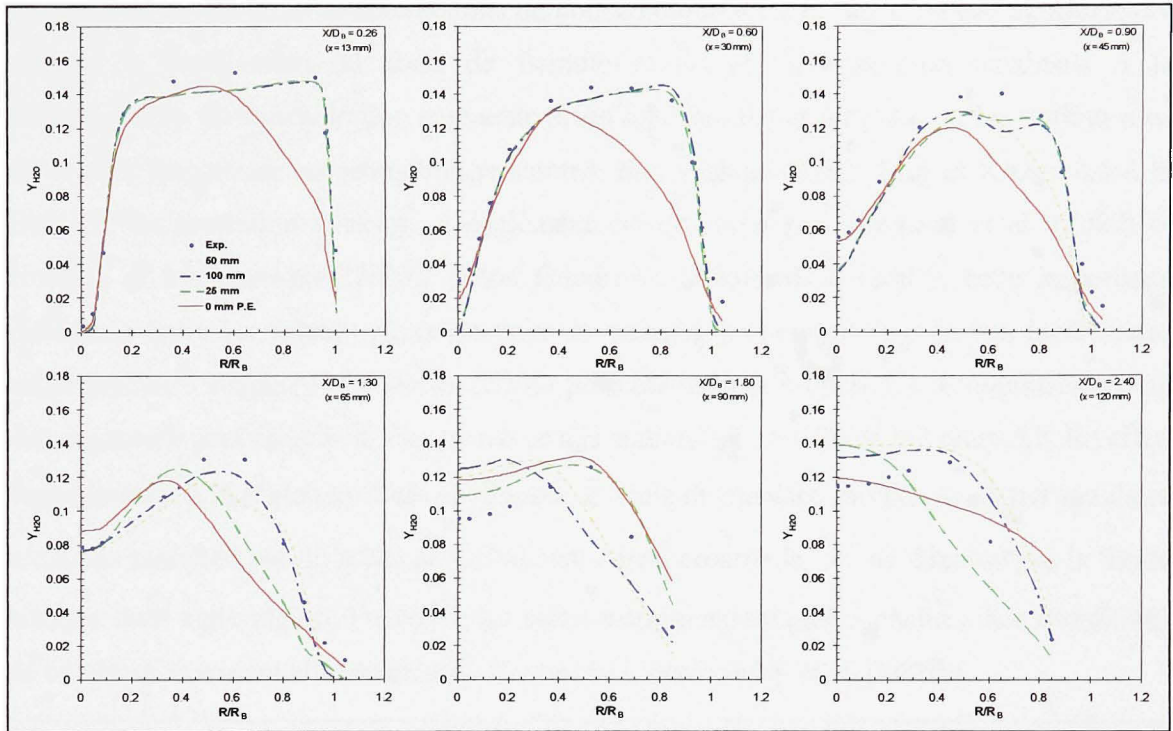


Figure 5.10 Comparaison entre les valeurs expérimentales et numériques des concentrations de H₂O, en fonction de différentes longueurs de canaux annulaires, pour l'étude du champ scalaire de l'écoulement réactif HM1.

Tel que décrit à l'équation 5.1, représentant la réaction simplifiée et balancée de combustion du méthane, l'eau est la molécule qui se retrouve en plus grande quantité dans les produits.



Avec la technologie de mesure au laser, le niveau d'absorption d'énergie du H₂O est également utilisé pour mesurer d'autres variables comme la température Cai et al. (2009). Comme à l'approche de la stœchiométrie, la température augmente et plus de carburant est transformé en produit, l'eau demeure une molécule intéressante à regarder afin de voir comment évolue la réaction chimique. Par exemple, la surestimation de température de la Figure 5.9 aux stations $X/D_B = 1.8$ et $X/D_B = 2.4$ est encore perceptible à la Figure 5.8 avec une surestimation de la concentration en H₂O dans ces régions. Le modèle de 0 mm demeure celui qui fournit les moins bonnes prédictions.

La Figure 5.11 présente les prédictions de concentration en OH. Cette espèce intermédiaire marque la localisation du front de flamme et est en concentration maximale à la stœchiométrie. Sa concentration augmente jusqu'à $X/D_B = 0.9$ et décroît dans les stations plus en aval. L'importante surestimation rencontrée aux stations $X/D_B = 0.26$ et $X/D_B = 0.6$ à la frontière du tourbillon extérieur a également été observée par Ravikanti et al. (2009) et Hossain et Malalasekera (2003). Selon Odedra et Malalasekera (2007), cette importante différence entre les valeurs expérimentales et numériques pourrait être dû aux incertitudes expérimentales suggérées par Kuan (2005) présenté dans la section 5.3. L'hypothèse de ce dernier auteur peut également être observée à la station $X/D_B = 0.26$ de la Figure 5.8. En effet, contrairement à la région de l'axe central où $\tilde{\chi}$ varie de manière abrupte, la région annulaire n'est pas marquée par de telles perturbations. Ainsi, comme le $\tilde{\chi}$ ne dépasse pas la limite critique dans cette région, l'écoulement serait théoriquement moins enclin à des instabilités de combustion, créant elles-mêmes de l'extinction locale Dally et al. (1998b).

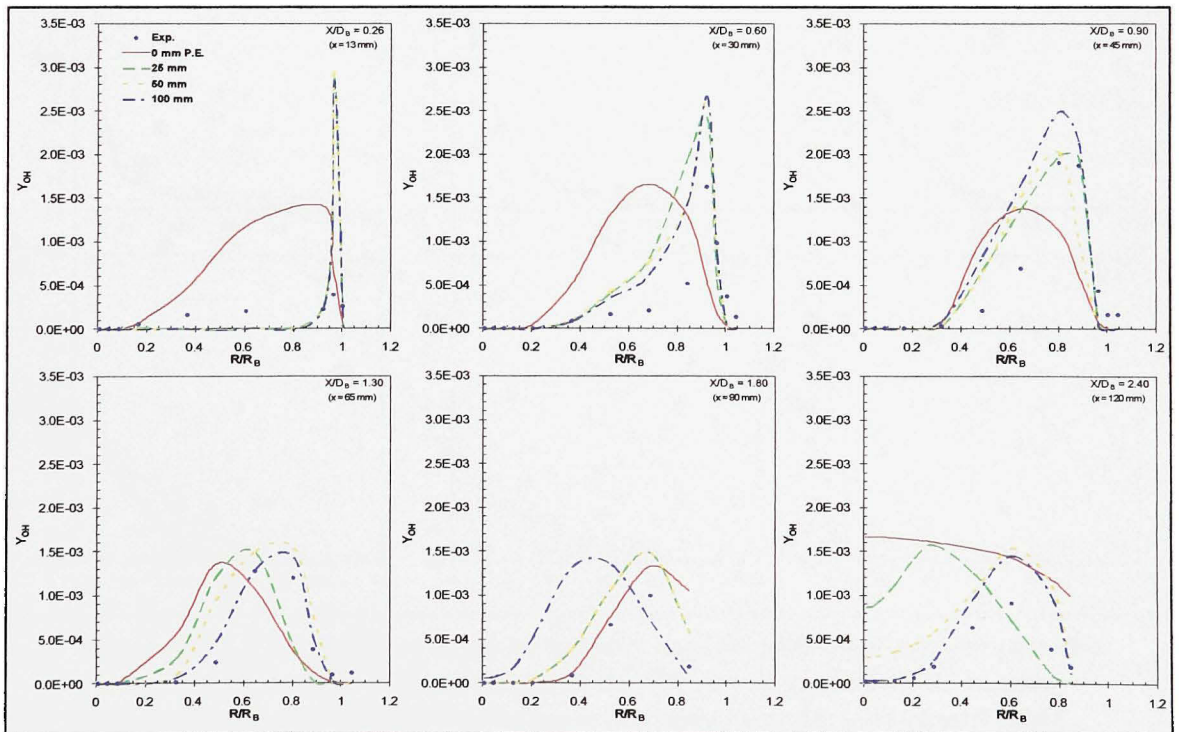


Figure 5.11 Comparaison entre les valeurs expérimentales et numériques des concentrations de OH, en fonction de différentes longueurs de canaux annulaires, pour l'étude du champ scalaire de l'écoulement réactif HM1.

Comme le taux de dissipation du scalaire passif n'a pas été mesuré expérimentalement il est difficile de confirmer cette hypothèse en se basant uniquement sur ce critère. Finalement, tel que suggéré par Hossain et al. (2001), une amélioration non négligeable de prédiction du OH aurait pu être apportée aux stations en amont, i.e. $X/D_B = 0.26$ et $X/D_B = 0.5$, si le transfert de chaleur par radiation avait été pris en compte.

La Figure 5.12 montre les fractions massiques de méthane. Les données expérimentales utilisées ici sont celles publiées par Odedra et Malalasekera (2007). Cette espèce est tracée afin d'évaluer la diffusion du carburant dans le domaine et ainsi voir comment évolue les réactions chimiques dans le domaine de calcul.

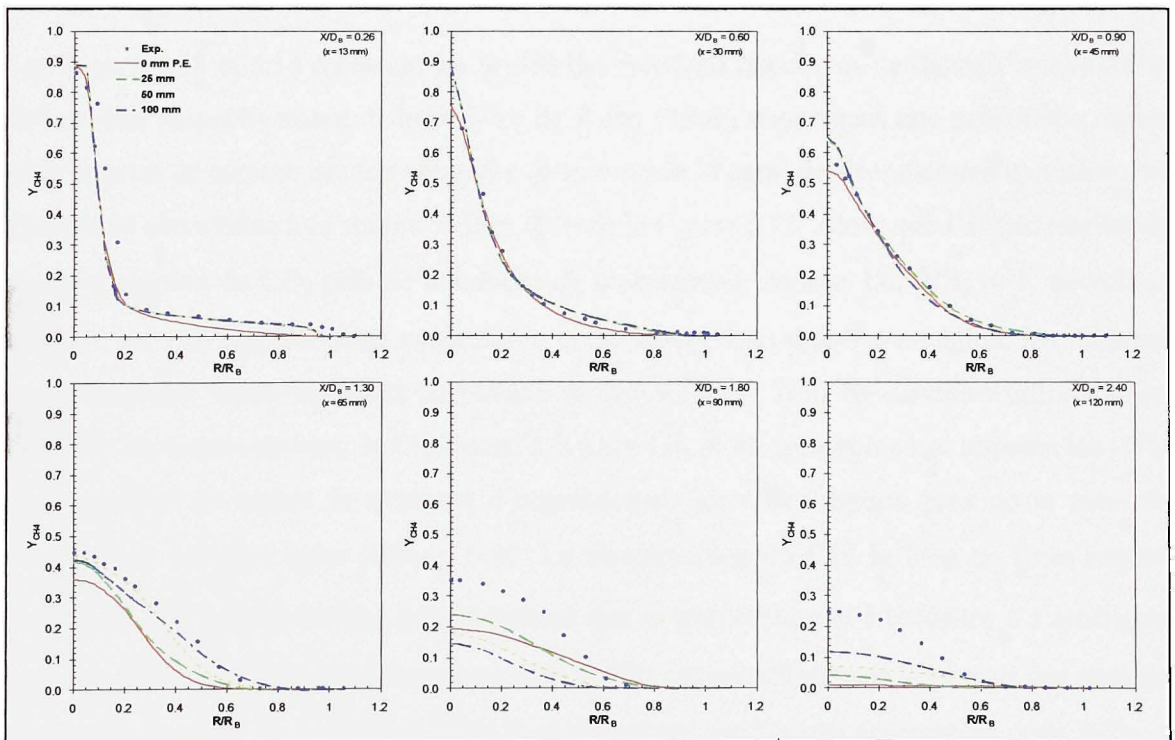


Figure 5.12 Comparaison entre les valeurs expérimentales et numériques des concentrations de CH₄, en fonction de différentes longueurs de canaux annulaires, pour l'étude du champ scalaire de l'écoulement réactif HM1.

Même si le carburant est composé d'hydrogène à 50% volume, cet élément n'a pas été tracé, car celui-ci se forme également lors de l'oxydation du méthane devenant ainsi un moins bon indicateur de l'évolution des réactions chimiques.

Les résultats des modèles CFU sont similaires entre eux et apportent de bonnes prédictions jusqu'à $X/D_B = 0.90$ avec une légère surestimation le long de l'axe central. Ce comportement est conséquent avec les prédictions du scalaire passif Z lui-même surestimé dans la région de fort cisaillement central. Le problème de diffusion de l'écoulement se fait également ressentir dans les prédictions des concentrations de méthane pour les stations supérieures à $X/D_B = 1.3$. En effet, l'appauvrissement du mélange (se rapprochant de la stœchiométrie), est conséquent avec la surestimation des températures de ces mêmes stations.

Les Figure 5.13 et 5.14 montrent les profils des fractions massiques de dioxyde et monoxyde de carbone respectivement. L'hypothèse de Kuan (2005) concernant une potentielle erreur dans la prise de mesure des températures de la zone de la paroi de l'écoulement annulaire, est également observable à la station $X/D_B = 0.26$ de la Figure 5.13. Alors que l'augmentation de la concentration de CO_2 près de la couche de cisaillement externe, i.e. $R/R_B \approx 1$, devrait se traduire par une augmentation progressive de la température dans cette région, les mesures expérimentales montrent plutôt un plateau de température. Tous les modèles utilisés sous-estiment les concentrations de CO_2 jusqu'à $X/D_B = 1.3$, alors que seuls ceux utilisant les CFU sont capables de capter la tendance d'augmentation en concentration près de la zone de cisaillement extérieur pour $X/D_B \leq 0.90$. La surestimation du CO_2 le long de l'axe central pour $X/D_B \geq 1.3$ suit le même comportement que la température et à tendance à s'améliorer plus loin radialement. Contrairement au CO_2 , le CO est surestimé pour la plupart des stations de mesure et seuls les modèles à CFU fournissent des prédictions acceptables pour $X/D_B \leq 0.90$. Plus loin dans le domaine, les prédictions sont largement surestimées, conséquence directe de la mauvaise prédiction de Z .

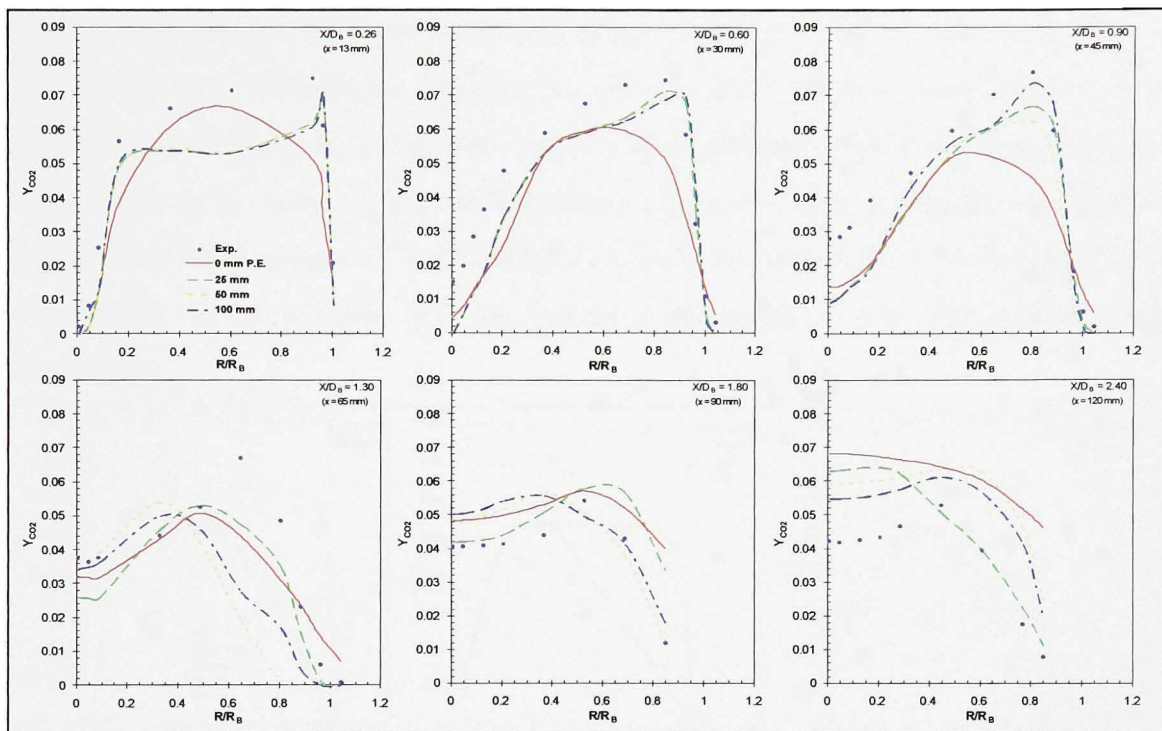


Figure 5.13 Comparaison entre les valeurs expérimentales et numériques des concentrations de CO₂, en fonction de différentes longueurs de canaux annulaires, pour l'étude du champ scalaire de l'écoulement réactif HM1.

Une des sources d'erreurs importantes dans l'évaluation des espèces chimiques avec CFX vient de l'interaction avec la bibliothèque de flamme. En effet, selon l'équation de température (2.80) CFX devrait se baser sur $\tilde{\chi}_{st}$ pour calculer la température ainsi que pour interpoler la concentration des espèces dans la bibliothèque de flamme. Selon le manuel de l'utilisateur, CFX utilise non pas $\tilde{\chi}_{st}$ mais pas plutôt $\tilde{\chi}$ local, dans un souci d'économie de temps de calcul. Cette approximation est par contre exacte seulement pour les espèces produites à la stœchiométrie telle que le OH. Dans le cas des autres espèces comme le CO₂ et le CO qui sont produites en quantité non négligeable pour n'importe quelles valeurs de $\tilde{\chi}$, cette approximation peu engendrer des erreurs de prédictions avec les données expérimentales. En effet, comme $\tilde{\chi}$ est construit à partir de k et ϵ , si ces deux derniers paramètres sont mal évalués, l'utilisation de la valeur locale au lieu de la valeur stœchiométrique diminue d'autant plus la fiabilité des prédictions. A cette erreur, s'additionne

aussi le problème de différence entre les valeurs établies a priori pour $\tilde{\chi}$ lors de la construction de la bibliothèque et celles calculées par CFX. En effet, tel qu'illustré sur la Figure 5.8, les valeurs de $\tilde{\chi}$ calculées par CFX sont majoritairement supérieures à celles utilisées lors de la construction de la bibliothèque de flamme (afin de minimiser la quantité de $\tilde{\chi}$ éteint). Ainsi, comme CFX est appelé à interpoler des valeurs de $\tilde{\chi}$ très loin hors de la bibliothèque, il est possible que des erreurs d'interpolations non négligeables soient introduites.

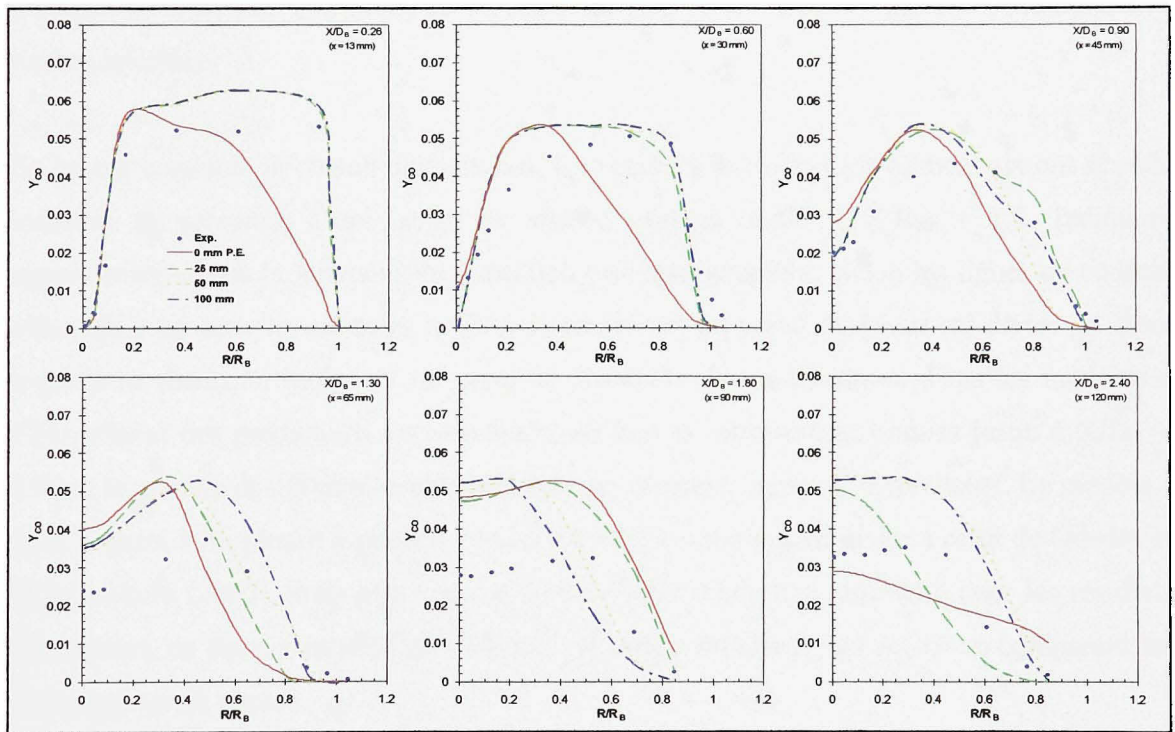


Figure 5.14 Comparaison entre les valeurs expérimentales et numériques des concentrations de CO, en fonction de différentes longueurs de canaux annulaires, pour l'étude du champ scalaire de l'écoulement réactif HM1.

5.5 Conclusion écoulement réactif

Les résultats de ce chapitre ont été obtenus en utilisant l'hypothèse de régime de combustion flammelette pour toutes les régions de la flamme. Une des conclusions importantes de ce chapitre est que les profils expérimentaux, utilisés avec succès pour l'écoulement inerte, n'ont pas apporté les améliorations escomptées pour l'écoulement réactif. Même si les profils

expérimentaux sont fournis en terme des ratios pour les vitesses axiales et leurs fluctuations respectives, il est possible que ces profils ne s'appliquent pas à l'écoulement réactif; la combustion et la turbulence étant deux phénomènes fortement couplés. En effet, comme il n'est pas mentionné si les conditions aux limites ont été mesurées avec un écoulement inerte ou réactif, il serait possible que ces ratios ne soient pas applicables avec ce dernier type d'écoulement. Les profils de U et u' aux entrées effectives du domaine de combustion ont également montré que, même avec un canal de développement de jet identique pour les modèles CFE et CFU, la zone de cisaillement interne est affectée par les conditions aux limites latérales.

En ce qui concerne le champ de vectoriel, les vecteurs de vitesse expérimentaux ont semblé indiquer la présence d'une zone de vitesse presque nulle à $X/D_B = 1.8$, indiquant approximativement la longueur du tourbillon principal extérieur. Selon les lignes de courant obtenues pour tous les modèles à CFU, le tourbillon principal extérieur est divisé en deux tourbillons distincts, indiquant un possible problème de modélisation. Tous les modèles à CFU offrent des prédictions vectorielles similaires et relativement bonnes jusqu'à $X/D_B = 0.90$ et le modèle de 100mm semble apporter des résultats légèrement meilleurs. Le modèle à CFE a quant à lui réussi à prédire un seul tourbillon extérieur similaire à celui de Odedra et Malalasekera (2007), mais plus court d'environ 20%. Malgré la similarité avec les résultats des auteurs, ce dernier modèle ne s'est pas avéré être supérieur aux autres en comparant les composantes de vitesse.

La qualité des prédictions en espèces chimiques est étroitement reliée à la bibliothèque de flamme ainsi qu'au mécanisme chimique utilisé. Ainsi, le caractère trop dissipatif de Z (engendrée par le modèle de turbulence) pour les stations en aval, i.e. $X/D_B \geq 1.3$, n'a pas permis d'apporter de bonnes prédictions des espèces chimiques de ces régions. La mauvaise estimation de ces dernières peut également être dû à la mauvaise utilisation du taux de dissipation scalaire lors de la recherche dans la bibliothèque de flamme ainsi qu'à la disparité de cette variable entre les valeurs de la bibliothèque de flamme et celle calculée par CFX. Finalement, le mécanisme de combustion a pu également avoir une influence sur les

prédictions des espèces. Par exemple, les problèmes reliés aux prédictions de CO et CO₂ de cette étude numérique ont également été rencontrés par Yan et al. (2004) lors de l'utilisation de ce même mécanisme de réactions. Les températures, non évaluées à partir de la bibliothèque de flamme, ont été mieux prédites pour la majorité des stations à l'exception de la région de l'axe central pour $X/D_B \geq 1.8$. La différence de qualité de prédiction entre la température et la concentration des espèces chimiques semble montrer une certaine incohérence dans l'utilisation du modèle flammelette implémenté dans CFX. En effet, selon la technique utilisée par plusieurs auteurs (Hossain et al. (2001), Ravikanti et al. (2009), Kempf et al. (2006)) les températures sont tabulées en même temps que les concentrations dans la bibliothèque de flamme. Contrairement à CFX, les codes numériques maison n'utilisent donc pas l'équation d'énergie afin de résoudre la température. Comme les prédictions des espèces sont généralement moins bonnes que les températures, il est alors possible que la bibliothèque de flamme et le mécanisme de réactions soient en parti responsable pour des erreurs de prédiction.

La différence observée entre les données numériques et expérimentales peut être également associée aux erreurs expérimentales suggérées par Kuan (2005). Ainsi, dû à un problème d'homogénéité des conditions aux limites annulaires du cas HM1, un second cas plus lent (HM1E) a été mesurée. Même si les mesures expérimentales des quantités vectorielles étaient disponibles pour les cas HM1 et HM1E, les mesures des quantités scalaires n'étaient quant à elles seulement disponibles que pour le cas HM1. Même si une simulation du champ vectoriel HM1E aurait permis une seconde validation à chaud des modèles de turbulence, le problème de prédiction des quantités scalaires serait demeuré le même que pour le cas HM1. En effet, comme le calcul de toutes les quantités scalaires repose sur les grandeurs turbulentes k et ϵ au travers de $\tilde{\chi}$ dans la modélisation de CFX, les bonnes prédictions de ces variables sont cruciales. Or, si pour des raisons expérimentales les conditions aux limites de k et ϵ varient fortement en fonction de la non homogénéité de l'écoulement annulaire, il est alors difficile pour le code numérique d'apporter de bonnes prédictions des quantités scalaires.

Malgré les problèmes de concordance avec les données expérimentales dû à la défaillance des modèles de turbulence et de combustion utilisées, l'influence des conditions aux limites latérales a démontré clairement l'effet de cette variable sur la structure de l'écoulement turbulent. Les conclusions de Ravikanti et al. (2009) concernant la qualité des conditions aux limites annulaires ont également pu être validé dans ce mémoire. De plus, les bonnes prédictions vectorielles obtenues par Odedra et Malalasekera (2007), ayant utilisé un modèle DRSM, semblent également pointer vers le fait que les conditions aux limites semblent avoir un effet aussi important que le modèle de turbulence proprement dit.

Afin de résumer tous les cas de simulations numériques qui ont été effectuées avec l'écoulement réactif, le Tableau 5.1 présente les diverses configurations, modèles et conditions aux limites utilisées.

Tableau 5.1 Sommaire des simulations effectuées pour les cas réactifs HM1 de Dally et al. (1998a)

Modèle de turbulence	EARSM
Intensité turbulente	5%,
Temp. Ouverture latérale	300, 1000, 1500
Maillage	361 000 noeuds
Conditions aux limites annulaires	- CFU (canal de 25, 50 et 100mm) - CFE (pas de canal)
Modèle de combustion	flammelette

CONCLUSIONS

L'objectif principal de ce mémoire était de valider l'effet des conditions aux limites de l'écoulement annulaire sur les prédictions du champ vectoriel et scalaire d'un cas de combustion turbulente non prémélangée. La première étape de ce mémoire consistait en une étude des modèles de turbulence disponibles dans le code numérique, afin de résoudre l'écoulement turbulente réactif. Cette première phase du projet a été effectuée sur le cas inerte de Dally et al. (1998a), afin de diminuer le degré de complexité et se concentrer uniquement sur le caractère turbulent de l'écoulement.

Dû à une trop grande similitude entre la quantité de volumes finis des maillages, il n'a pas été possible d'appliquer la méthode GCI afin d'évaluer l'erreur relative numérique liée à l'utilisation du maillage intermédiaire plutôt que fin. Néanmoins, même si une étude de maille plus approfondi permettrait d'établir l'indépendance de la discrétisation sur les solutions numériques, deux types de maillage intermédiaire ont été retenus, respectivement pour les modèles de turbulence à deux équations et ceux de DRSM. L'analyse des divers modèles utilisés dans ces deux catégories a démontré que les modèles $k-\epsilon$ EARSM et LRR offraient les meilleures performances de prédictions. Dû à ses restrictions et son coût de calcul plus élevé ainsi qu'à la mince amélioration apportée par rapport au modèle $k-\epsilon$ EARSM, le modèle LRR n'a pas été retenu pour l'analyse des conditions aux limites annulaires des écoulements inertes et réactifs.

Le premier cas de validation servant à analyser l'effet des conditions aux limites annulaires, a été effectué sur l'écoulement inerte. Par rapport aux CFU, l'utilisation des CFE a fourni une amélioration importante sur les prédictions de U , u' , V et v' pour les stations de mesures. Ainsi, tel que mentionné par Ravikanti et al. (2009), la description des conditions aux limites annulaires à l'entrée du domaine effectif de combustion semble influencer les stations en aval de la zone de mélange, i.e. $X/D_B > 1.8$. Globalement, les prédictions de vitesses étaient relativement bonnes pour toutes les stations de mesures considérées.

La turbulence et la combustion étant deux phénomènes fortement couplés, la seconde partie de ce mémoire avait pour objectif de valider si les conclusions du cas inerte, quant à l'effet des conditions aux limites annulaires, s'appliquaient également pour l'écoulement réactif. En plus du modèle à CFE, d'autres cas réactifs à CFU ont été testés, mais cette fois-ci en variant la longueur du canal annulaire de développement. Lorsque comparée avec l'écoulement inerte, les prédictions de l'écoulement réactif sont beaucoup moins fidèles aux données expérimentales. Ainsi, la validité du champ de vitesse est réduite à $X/D_B \leq 0.9$. Contrairement à l'écoulement inerte, le modèle à CFE apporte de moins bonnes prédictions que les modèles à CFU. La variation des conditions aux limites annulaires, lorsque décrite avec la variation de la longueur du canal de développement annulaire, a également démontré que l'effet de ces variations se fait ressentir davantage en aval du domaine de calcul, c'est-à-dire pour $X/D_B \geq 1.3$. En ne tenant pas compte du modèle à CFE, les prédictions des grandeurs scalaires sont relativement bonnes $X/D_B \leq 0.9$. Au-delà de cette limite, les prédictions de Z et des concentrations en espèces chimiques varient beaucoup en fonction des modèles CFU et c'est celui de 100 mm qui apportent, dans l'ensemble, les meilleures prédictions. Le manque de cohérence dans l'application du modèle flammelette avec CFX se fait ressentir lors de la comparaison entre les prédictions des espèces chimiques et des températures. En effet, comme les températures ne sont pas déduites à partir de la bibliothèque de flamme et que les prédictions de celles-ci sont beaucoup meilleures que celles des espèces chimiques, il est probable que la bibliothèque de flamme ou le mécanisme de réactions chimiques soient en cause dans l'erreur de prédiction des concentrations.

Aux travers des profils de U et u' à l'entrée du domaine effectif de combustion, l'étude des conditions aux limites a permis d'illustrer que les zones de cisaillement internes et externes, dictant le comportement des zones de recirculation, sont affectées par l'écoulement annulaire. Cette dernière observation permet d'affirmer que l'objectif initial, de valider l'effet des conditions aux limites annulaires, a été atteint.

Finalement, l'utilisation du code général commercial CFX[®] a permis de démontrer qu'il est possible d'obtenir des prédictions relativement bonnes pour les cas de combustion turbulente non prémélangée et ce, avec des coûts de calculs relativement peu élevés. Dû à l'importance des conditions aux limites annulaires sur l'écoulement en aval, l'utilisation de CFE bien définie aurait également le potentiel d'améliorer le champ de validité des prédictions numériques.

RECOMMANDATIONS

Peu d'auteurs de la littérature se sont concentrés sur l'effet des conditions aux limites annulaires sur les prédictions de l'écoulement réactif. Afin de documenter plus profondément les hypothèses proposées par Ravikanti et al. (2009) et de poursuivre l'investigation commencée ici, il serait intéressant de continuer l'étude des modèles à CFU, mais en utilisant cette fois les modèles DRSM qui ont théoriquement un meilleur potentiel pour modéliser le transport turbulent. Afin de poursuivre l'objectif de validation de logiciels commerciaux utilisés en industrie, il serait toutefois important de choisir un code permettant d'utiliser les modèles DRSM sans restriction quant au maillage (2D ou 3D), aux conditions aux limites utilisées (périodicité, symétrie) ou au type d'écoulement choisi (inerte vs turbulent).

Les profils de U et u' aux entrées effectives du domaine de combustion ont permis de constater l'impact des conditions aux limites annulaire sur le comportement de l'écoulement près des parois. Une étude de raffinement de maille près des parois pourrait permettre de voir l'effet du maillage sur les prédictions des zones de cisaillement.

Un autre aspect qui aurait pu être étudié ici est l'interaction entre la bibliothèque de flamme et la qualité des prédictions de l'écoulement réactif. En effet, comme la table de valeur a été construite de manière indépendante aux simulations numériques de l'écoulement, la valeur critique de $\tilde{\chi}$ a été établie en fonction de paramètres intrinsèques aux carburants et à l'oxydant. Or, tel que décrit précédemment, les résultats numériques de $\tilde{\chi}$ calculés par CFX ont montré une forte différence avec les valeurs utilisées lors de la construction de la bibliothèque de flamme. Ainsi, une étude de sensibilité de ce paramètre, lors de la création de la table de valeurs, permettrait alors de voir l'influence qu'a $\tilde{\chi}_{cr}$ pour traiter l'instabilité de flamme et l'extinction locale. Finalement, l'utilisation d'une bibliothèque de flamme incluant les températures, permettrait, à travers d'un post-traitement indépendant de CFX, de valider quelle technique est la plus efficace pour calculer et prédire la température.

Expérimentalement, certaines améliorations pourraient aussi être apportées. Premièrement, dans la majeure partie des cas, les calculs du champ de vitesse et des espèces chimiques sont des processus couplés en simulation numérique. Il serait donc important que les mesures expérimentales des quantités scalaires et vectorielles soient prises au même moment et avec des vitesses assurant l'homogénéité des écoulements. Dans un deuxième temps, si le but de la simulation numérique est de valider l'influence des modèles de turbulence et de combustion, il serait important de s'assurer de l'exactitude des conditions aux limites expérimentales. Par exemple, en modifiant les dimensions du brûleur afin de s'assurer que l'écoulement annulaire puisse être considéré comme pleinement développé, il serait possible de diminuer les sources d'erreurs dû aux problèmes de description des conditions aux limites annulaires.

BIBLIOGRAPHIE

- ANSYS_inc. 2009. « ANSYS CFX Manual ».
- Barth, T.J., et D.C. Jespersen. 1989. « The design and application of upwind schemes on unstructured meshes ». *AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit*, vol. 89, p. 366.
- Borghini, R., et M. Champion. 2000. *Modélisation et théorie des flammes laminaires*. Paris (France): Éditions TECHNIP.
- Boussinesq, J. 1877. *Théorie de l'écoulement tourbillonnant et tumultueux des liquides dans les lits rectilignes à grande section*, 2. Paris.
- Bowman, C.T, R.K. Hanson, D.F. Davidson, W.C. Gardiner Jr., V.V. Lissianski, G.P. Smith, D.M. Golden, M. Frenklach et M. Goldenberg. *GRI-MECH 2.11*. http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/.
- Broadhead, B.L., B.T. Rearden, C.M. Hiopper, J.J. Wagschal et C.V. Parks. 2004. « Sensitivity and uncertainty-based criticality safety validation techniques ». *Nuclear Science and Engineering*, vol. 146, n° 3, p. 340-366.
- Burke, S.P., et T.E.W Schumann. 1928. « Diffusion flame ». *Industrial and Engineering Chemistry*, vol. 20, n° 10, p. 6.
- Cai, Tingdong, Hui Jia, Guishi Wang, Weidong Chen et Xiaoming Gao. 2009. « A Sensor for measurements of temperature and water concentration using a single tunable diode laser near 1.4 um. ». *Sensors and Actuators A: Physical*, vol. 152, n° 1, p. 5-12.
- Celik, I.B., U. Ghia, P. J. Roache, C.J. Freitas, H. Coleman et P.E. Raad. 2008. « Procedure for estimation and reporting of uncertainty due to discretization in CFD applications ». *Journal of Fluids Engineering*, vol. 130, n° 7, p. 078001-4.
- Dally, B. B., D. F. Fletcher et A. R. Masri. 1998a. « Flow and mixing fields of turbulent bluff-body jets and flames ». *Combustion Theory and Modelling*, vol. 2, n° 2, p. 193 - 219.
- Dally, B. B., A. R. Masri, R. S. Barlow et G. J. Fiechtner. 1998b. « Instantaneous and mean compositional structure of bluff-body stabilized nonpremixed flames ». *Combustion and Flame*, vol. 114, n° 1-2, p. 119-148.
- Dally, Bart J., et Francis H. Harlow. 1970. « Transport equations in turbulence ». *Physics of Fluids*, vol. 13, n° 11, p. 2634-2649.

- Donbar, Jeffrey M., James F. Driscoll et Campbell D. Carter. 2001. « Strain rates measured along the wrinkled flame contour within turbulent non-premixed jet flames ». *Combustion and Flame*, vol. 125, n° 4, p. 1239-1257.
- Eça, L., M. Hoekstra et P. J. Roache. 2005. « Verification of calculations: an overview of the lisbon workshop ». In *AIAA Computational Fluid Dynamic Conference*. Miami (FL.): AIAA.
- Effelsberg, E., et N. Peters. 1988. « Scalar dissipation rate in turbulent jets and jet diffusion flames ». *Proceeding of the Combustion Institute*, vol. 22, p. 7.
- Favre, A. 1969. « Statistical equations of turbulent gases ». *Problems of hydrodynamics and continuum mechanics* (Philadelphia). p. 231-266.
- Hanjalic, K., et S. Jakirlic. 2002. *Closure strategies for turbulent and transitional flows*. Cambridge: Launder, B. & Sandham, N.
- Hanjalic, K., et B. E. Launder. 1972. « A Reynolds stress model of turbulence and its application to thin shear flows ». *Journal of Fluid Mechanics Digital Archive*, vol. 52, n° 04, p. 609-638.
- Hinze, J.O. 1975. *Turbulence*. New York.
- Hossain, M., J. C. Jones et W. Malalasekera. 2001. « Modelling of a bluff-body nonpremixed flame using a coupled radiation/flamelet combustion model ». *Flow, Turbulence and Combustion*, vol. 67, n° 3, p. 217-234.
- Hossain, M., et W. Malalasekera. 2003. « Modelling of a bluff-body stabilized CH₄/H₂ flame based on a laminar flamelet model with emphasis on NO prediction ». *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part A: Journal of Power and Energy*, vol. 217, n° 2, p. 201-210.
- Hossain, M., et W. Malalasekera. 2005. « Numerical study of bluff-body non-premixed flame structures using laminar flamelet model ». *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part A: Journal of Power and Energy*, vol. 219, n° 5, p. 361-370.
- Jones, W. P. (309-374). 1994. *Turbulence modeling and numerical solution methods for variable density and combustng flows*. Coll. « Turbulent Reacting Flows ». London: Academic Press.
- Jones, W. P., et P. Musonge. 1988. « Closure of the reynolds stress and scalar flux equations ». *Physics of Fluids*, vol. 31, n° 12, p. 3589-3604.

- Kempf, A., R. P. Lindstedt et J. Janicka. 2006. « Large-eddy simulation of a bluff-body stabilized nonpremixed flame ». *Combustion and Flame*, vol. 144, n° 1-2, p. 170-189.
- Kuan, T.S., Lindstedt, R.P. 2005. « Transported probability density function modeling of a bluff-body stabilised turbulent flame ». In *Proceeding Combustion Institute*. Vol. 30, p. 767-774.
- Launder, B. E., G. J. Reece et W. Rodi. 1975. « Progress in the development of a Reynolds-stress turbulence closure ». *Journal of Fluid Mechanics Digital Archive*, vol. 68, n° 03, p. 537-566.
- Launder, Brian E. 1989. « Second-moment closure: present... and future? ». *International Journal of Heat and Fluid Flow*, vol. 10, n° 4, p. 282-300.
- Li, G., B. Naud et D. Roekaerts. 2003. « Numerical investigation of a bluff-body stabilised nonpremixed flame with differential reynolds-stress models ». *Flow, Turbulence and Combustion*, vol. 70, n° 1, p. 211-240.
- Marracino, B., et D. Lentini. 1997. « Radiation modelling in non-luminous nonpremixed turbulent flames ». *Combustion Science and Technology*, vol. 128, n° 1, p. 23 - 48.
- MCGuirk, J.J., et W. Rodi. 1977. « The calculation of three-dimensional turbulent free jets ». In *1st Symposium on Turbulent Shear Flows*. p. 1.29-1.36. University Park, PA.
- Menter, F. 1994. « Two-equations eddy-viscosity turbulence models for engineering applications ». *AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit*, vol. 32, p. 1598-1605.
- Murphy, A.B., et A.J.D Farmer. 1992. « Temperature measurement in thermal plasmas by Rayleigh scattering ». *Journal of Physics D: Applied Physics*, vol. 25, n° 4.
- Nieckle, O.A. 2006. « Turbulência ». Note de cours, Rio de Janeiro, Pontificat Universidade Catolica do Rio de Janeiro.
- Odedra, Anand, et W. Malalasekera. 2007. « Eulerian particle flamelet modeling of a bluff-body CH₄/H₂ flame ». *Combustion and Flame*, vol. 151, n° 3, p. 512-531.
- Papageorgakis, G.C., et D.N. Assanis. 1999. « Comparison of linear and nonlinear RNG-base k-epsilon models for incompressible turbulent flows ». *Numerical Heat Transfer Part B: Fundamentals*. p. 22.
- Peters, N. 1984. « Laminar diffusion flamelet models in non-premixed turbulent combustion ». *Progress in Energy and Combustion Science*, vol. 10, n° 3, p. 319-339.

- Peters, N. 1993. *Reduced kinetic mechanisms for applications in combustion systems*. Coll. « Flame calculations with reduced mechanisms-an outline ». Berlin: Springer-Verlag, 3-14 p.
- Peters, N. 2000. *Turbulent combustion*. Cambridge: Cambridge University Press.
- Pitsh, H., M. Chen et N. Peters. 1998a. « Strain rates measured along the wrinkled flame contour within turbulent non-premixed jet flames ». *Proceeding of the Combustion Institute*, vol. 27, p. 7.
- Pitsh, H., M. Chen et N. Peters. 1998b. « Unsteady flamelet modeling of turbulent hydrogen-air diffusion flames ». *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 27, p. 1057-1064.
- Pitsh, H., et H. Steiner. 2000. « Scalar mixing and dissipation rate in large-eddy simulations of nonpremixed turbulent combustion ». *Proceeding of the Combustion Institute*, vol. 28, p. 9.
- Poinsot, T. , et D. Veynante. 2005. *Theoretical and numerical combustion*, 2e édition. Livre. Coll. « N/A ». Philadelphie, PA, USA: Edwards, 522 p.
- Pope, S. B. 2000. *Turbulent flows*. Coll. « Cambridge University Press ». Cambridge.
- Raman, Venkatramanan, et Heinz Pitsch. 2005. « Large-eddy simulation of a bluff-body-stabilized non-premixed flame using a recursive filter-refinement procedure ». *Combustion and Flame*, vol. 142, n° 4, p. 329-347.
- Ravikanti, M., M. Hossain et W. Malalasekera. 2009. « Laminar flamelet model prediction of NO_x formation in a turbulent bluff body combustor ». *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part A: Journal of Power and Energy*, vol. 223, n° 1, p. 41-54.
- Richardson, L. F. 1911. « The approximate arithmetical solution by finite differences of physical problems involving differential equations, with an application to the stresses in a masonry dam ». *Philosophical Transactions of the Royal Society of London, SERIES A* (London). p. 50.
- Roache, P. J. 1994. « Perspective: a method for uniform reporting of grid refinement studies ». *Journal of Fluids Engineering*, vol. 116, n° 3, p. 405-413.
- Rodi, W. 1972. « The prediction of free turbulent boundary layers by use if a two-equation model of turbulence ». Thèse de Doctorat.
- Rodi, W. 1976. « A new algebraic relation for calculating the Reynolds stresses ». *Z. Angew. Math. Mech*, vol. 56, p. 219-221.

- Roekaerts, D. (47-101). 2002. *Reacting flows and probability density function methods*. Coll. « Closure Strategies for Turbulent and Transitional Flows ». Cambridge: Cambridge University Press.
- Schefer, R. W., M. Namazian et J. Kelly. 1987. « Velocity measurements in a turbulent nonpremixed bluff-body stabilized flame ». *Combustion Science and Technology*, vol. 56, n° 4, p. 101 - 138.
- Smith, G.P., D.M. Golden, M. Frenklach, N.W. Moriarty, B. Eiteneer, M. Goldenberg, C.T. Bowman, R.K. Hanson, S. Song, W.C. Gardiner Jr., V.V. Lissianski et Z. Qin. *GRI-MECH 3.0*. <http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/>.
- Speziale, C.G., S. Sarkar et T.B. Gatski. 1991. « Modelling the pressure-strain correlation of turbulence: an invariant systems approach ». *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 227, n° 1, p. 27.
- Wallin, S., et A.V. Johansson. 2000. « An explicit algebraic Reynolds stress model for incompressible and compressible turbulent flows ». *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 403, p. 89-132.
- White, F.M. 2003. *Fluid mechanics*, International 5th edition. Coll. « Mechanical Engineering ». McGraw-Hill.
- Wilcox, D.C. 1988. « Reassessment of the scale-determining equation for advanced turbulence models ». *AIAA Journal*. p. 11.
- Wilcox, D.C. 2000. *Turbulence Modeling for CFD*, Deuxième Édition. DCW Industries.
- Williams, F.A. 1985. *Combustion theory*. Menlo Park, CA: Benjamin Cummings.
- Wouters, H.A. 1998. « Lagrangian models for turbulent reacting flows ». Thèse de doctorat, Delft, Technical University of Delft, 162 p.
- Wouters, H.A., P.A. Nooren, T.W.J. Peeters et D. Roekaerts. 1996. « Simulation of a bluff-body stabilized diffusion flame using second-moment closure and Monte Carlo methods ». *Proceeding of the Combustion Institute*, vol. 26, n° 1, p. 19.
- Yan, J., F. Thiele et M. Buffat. 2004. « A turbulence model sensitivity study for CH₄/H₂ Bluff-Body Stabilized Flames ». *Flow, Turbulence and Combustion*, vol. 73, n° 1, p. 1-24.
- Yang, S. L., B. D. Peschke et K. Hanjalic. 2000. « Second-moment closure model for IC engine flow simulation using kiva code ». *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, vol. 122, n° 2, p. 355-363.