



REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE  
MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR  
ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE

UNIVERSITE LARBI BEN M'HIDI – Oum El Bouaghi –



## *Thèse*

Présentée à

La faculté des sciences exactes, des sciences  
de la nature et de la vie – département de la matière

En vue d'obtenir le grade de docteur en sciences

Option : Physique Energétique

Par

**HADEF Amar**

## *Thème*

---

***Modélisation d'une Flamme de Diffusion Turbulente par le  
Concept de Flammelette Laminaire***

---

*Soutenue devant le Jury*

Président	KABOUCHE	Azzedine	Pr.	Univ. d'Oum El Bouaghi
Rapporteur	AOUACHRIA	Zeroual	Pr.	Univ. Batna 1
Examineurs	GUEMINI	Rebai	Pr.	Univ. d'Oum El Bouaghi
	BENISSAAD	Smail	Pr.	Univ. de Constantine 1
	BRIMA	Abdelhafid	Pr.	Univ. de Biskra
	ADOUANE	Belkacem	Pr.	Univ. Batna 1

## Remerciements

Deux personnes, que je n'arrive pas à trouver les mots pour les remercier, pour leur disponibilité, ces conseils et ses questions précises et pertinentes qui ont dirigé mon modeste travail vers le bon chemin, du moins que je l'espère, ne sont que le Professeur AOUACHRIA Zeroual et Dr MAMERIE Abdel Baki, sans eux, la réalisation de cette thèse aurait sans doute été impossible, sans oublier mon ami et frère Professeur REZGUI Yacine pour ces conseils.

J'exprime ma profonde reconnaissance au Professeur KAABOUCHE Azzedine pour m'avoir fait l'honneur de présider le jury de soutenance.

Je tiens à remercier également mon enseignant Professeur GUEMINI Rebai d'avoir accepté d'examiner le présent travail et de m'enrichir de ses remarques et critiques objectives.

Mes vifs remerciements et reconnaissances au Professeur BENISSAAD Smail, qui a accepté de juger ce modeste travail, ainsi que ses précieux conseils lors du 17ièmes JITH 2015 à Marseille.

Je tiens à remercier également le Professeur ADOUANE Belkacem directeur de laboratoire de physique énergétique appliquée- Université de Batna 1- d'accepter de juger mon travail, et son chaleureux accueil lors de mes visites aux LPEA, que je ne peux pas l'oublier.

Je tiens aussi à remercier Professeur BRIMA Abdelhafid d'avoir d'accepter d'examiner le présent travail et m'enrichir de ses remarques et critiques.

Il est impossible de passer en silence de l'aide qui est apportée par ma chère femme et ma Sœur bien aimée Nadia.

## Dédicace

Je dédie cet humble travail à :

La mémoire de mon père qui n'a pas cessé de sacrifié pour m'enseigner, puisse Dieu le miséricordieux ait pitié de son âme.

Ma chère maman, ma chère femme et mes enfants sans s'oublier ma sœur bien aimée Nadia.

Mon frère Fethi, sa femme et ses petites filles.

## Table des matières

Remerciement	i
Dédicace	ii
Communication et publications	iii
Nomenclature	iv
Sommaire	vi
<i>1. Introduction et synthèse bibliographique</i>	1
<i>2. Notions sur les flammes et régime de combustion</i>	9
2.1 Définitions .....	9
2.2. Caractéristiques des flammes de diffusion .....	12
2.3 Structure interne d'une flamme de diffusion .....	14
2.4 Interactions flamme/turbulence et digramme de combustion	
2.4.1 Flammes turbulentes pré-mélangées .....	16
2.4.2 Flammes turbulentes non pré-mélangées .....	18
Bibliographie .....	21
<i>3. Modélisation de l'écoulement turbulent</i>	23
3-1- Equations de Navier-Stokes moyennes .....	26
3-2 - Modèle de turbulence k-ε .....	29
3-3 - Correction de Pope .....	30
Bibliographie .....	32
<i>4. Modélisation de la combustion turbulente</i>	
4.1. Introduction .....	34
4.2. Modèle Eddy Break Up .....	36
4.3. Modèle EDM .....	38
4.4. Modèle de la fonction de densité de probabilité .....	38
4.4.1 La Fraction de mélange .....	38
4.4.2 Equation de transport de Fraction de mélange .....	40
4.4.3 Equation de transport de la variance .....	40
4.5 Modèles des flammelettes .....	42
4.5.1 Concept des flammelettes laminaires .....	43
4.5.2 Equations de la flammelette laminaire .....	44
4.5.3 Couplage de la flammelette laminaire et du champ d'écoulement turbulent	47

4.5.4 Génération des bibliothèques des flammelettes .....	49
4.6 Modélisation des émissions de NOx .....	50
4.6.1 Bref aperçu sur les NOx .....	50
4.6.2 Formation et réduction de NO thermique .....	51
4.6.3 Calcul de la concentration de l'oxygène monoatomique .....	54
4.6.4 Calcul de la concentration des radicaux OH .....	55
Bibliographie .....	56
<i>5. Méthode numérique de résolution</i>	
5.1 Résolution des équations de mouvement .....	59
5.1.1 Schéma amont de premier ordre (first order upwind) .....	62
5.1.2 Schéma amont deuxième ordre .....	63
5.1.3 Evaluation du terme diffusif .....	64
5.1.4 Discrétisation de l'équation de quantité de mouvement .....	66
5.1.5 Sous relaxation .....	69
Bibliographie .....	71
<i>6. Résultats et discussion</i>	
6.1 Premier cas (Flamme de diffusion turbulente H <sub>2</sub> /Air)	72
6.1.1 Description du problème physique et conditions aux limites .....	72
6.1.2 Résultat et discussion .....	74
6.2 Deuxième cas (Flamme de diffusion turbulente CH <sub>4</sub> /Air .....	83
6.2.1 Description du problème physique et conditions aux limites .....	83
6.2.2 Résultat et discussion .....	85
6.2.2.1 Validation de la procédure de calcul .....	85
6.2.2.2 Etude de l'effet de dilution par le CO <sub>2</sub> sur le champ thermique..	86
6.2.2.3 Etude de l'effet de dilution par le CO <sub>2</sub> sur le champ des espèces	88
6.2.2.4 L'effet chimique du CO <sub>2</sub> .....	91
<i>7. Conclusion générale et Perspectives</i> .....	95

## Nomenclature

$C_p$	Chaleur spécifique à pression constante du mélange	[J/(kg K)]
$C_{pk}$	Chaleur spécifique à pression constante de l'espèce k	[J/(kg K)]
$C_\mu; C_{\varepsilon 1}, C_{\varepsilon 2}, \sigma_k$ et $\sigma_\varepsilon$	Constantes du modèle k- $\varepsilon$	[--]
$D_k$	Coefficient de diffusion de l'espèce k dans le mélange	[m <sup>2</sup> /s]
$Da$	Nombre de Damkhöler	[--]
$D_{inj}$	Diamètre de l'injecteur (brûleur)	[m]
$e$	Energie interne spécifique du mélange	[J/kg]
$f_{kj}$	Force spécifique de volume agissante sur l'espèce k dans la direction j	[m/s <sup>2</sup> ]
$h_{f,k}^0$	Enthalpie chimique spécifique de l'espèce k	[J/kg]
$h_k$	Enthalpie spécifique de l'espèce k	[J/kg]
$h_{sk}$	Enthalpie sensible de l'espèce k	[J/kg]
$k$	Energie de turbulence	[m <sup>2</sup> /s <sup>2</sup> ]
$l$	Echelle intégrale de longueur	[m]
$Le_i$	Nombre de Lewis de l'espèce i ( $= \lambda_i / \rho_i C_{pi}$ )	[--]
$P$	Pression	[N/m <sup>2</sup> ]
$\dot{Q}$	Source de chaleur	[J/(m <sup>3</sup> s)]
$R$	Constante universelle des gaz parfaits	[J/(Kg K)]
$Re_t$	Nombre de Reynolds de la turbulence	[--]
$s$	Rapport stœchiométrique	[--]
$S_L$	Vitesse de la flamme laminaire	[m/s]
$Sc$	Nombre de Schmidt ( $= \mu_i / \rho_i D_i$ )	[--]
$T$	Température	[K]
$T^0$	Température maximale (adiabatique) de la flamme laminaire	[K]
$\tilde{T}$	Température moyenne	[K]
$t_n$	Echelle de temps de Kolmogorov	[s]
$u_i$	Vitesse dans la direction i	[m/s]
$u'_i$	Fluctuation de vitesse dans la direction i	[m/s]
$V_{k,i}$	Vitesse de diffusion de l'espèce k dans la direction i	[m/s]
$W_k$	Masse molaire de l'espèce k	[mole/kg]
$Y_k$	Fraction massique de l'espèce k	[--]
$Z$	Fraction de mélange	[--]
$\tilde{Z}_i$	Fraction de mélange moyenne de l'espèce i	[--]
$\tilde{Z}_i''$	Variance de la fraction de mélange moyenne de l'espèce i	[--]

## Lettres grecques

$\delta_{ij}$	Symbole de Krönecker (=1 si $i=j$ , =0 )	[--]
$\eta$	Echelle de longueur de Kolmogorov	[m]
$\varepsilon$	Taux de dissipation de l'énergie de turbulence	[m <sup>2</sup> /s <sup>3</sup> ]
$\mu$	Viscosité dynamique	[kg/(m s)]
$\mu_t$	Viscosité turbulente	[kg/(m s)]
$v'_k$	Coefficient stœchiométrique de l'espèce réactive k	[--]
$v''_k$	Coefficient stœchiométrique de l'espèce produite k	[--]
$\dot{\omega}_k$	Taux de production de l'espèce k	[mole/(m <sup>3</sup> s)]
$\dot{\omega}_T$	Taux de dégagement de chaleur due à la réaction	[J/(m <sup>3</sup> s)]
$\chi$	Taux de dissipation scalaire	[1/s]
$\kappa, \kappa_{lim}$	Invariant et invariant limité de la correction de Pope	[--]
$\rho_k$	Densité de l'espèce k	[kg/m <sup>3</sup> ]
$\sigma_{ij}$	Tenseur de la contrainte dans le plan i et la direction j	[N/m <sup>2</sup> ]
$\tau$	Echelle intégrale de temps	[s]
$\tau_{ij}$	Tenseur des contraintes visqueuses	[N/m <sup>2</sup> ]
$\tau_C$	Echelle de temps caractéristique de la réaction chimique	[s]
$\chi$	Taux de dissipation scalaire	[1/s]

## Indices

- b Gaz brûlés
- f Gaz frais
- F Fuel
- k Espèce k
- m Espèce m
- N Nombre de réactions élémentaires
- o Oxydant
- p A pression constante
- s Sensible (enthalpie)
- st Stœchiométrique
- v A volume constant

## Exposants

- ˆ Fluctuation (moyenne de Reynolds)
- ˆˆ Fluctuation (moyenne de Favre)
- Moyenne de Reynolds
- ˜ Moyenne de Favre

## Listes des figures

2.1:	Fraction molaire et la température pour différentes espèces en fonction de la fraction de mélange. Mesure par diffusion Raman dans une flamme H <sub>2</sub> /air	10
2.2:	Représentation schématique d'une flamme de diffusion laminaire.	13
2.3:	Représentation des profils de carb., Oxy. et Temp. à travers une flamme de diffusion classique.	14
2.4:	Diagramme de combustion turbulente pré-mélangée	17
2.5:	Représentation schématique des différents régimes de combustion turbulente non-prémélangée	20
3.1:	Domaines fréquentiels du spectre d'énergie turbulente calculés et/ou modélisés par la méthode RANS, LES et DNS	24
3.2:	Aperçu sur les différents modèles de turbulence	25
3.3:	(a) Jet rond axisymétrique                      (b) Jet avec plan de symétrie	31
4.1:	Trois types d'analyses des flammes turbulentes prémélangées ou non-prémélangées	35
4.2:	Exemple de l'injection séparée non pré-mélangée	39
4.3:	Iso-surface Z et son système de coordonnées orthogonal	44
4.4:	Relation entre le code CFD et le générateur de flammelettes	49
5.1:	Volume de contrôle bidimensionnel	60
5.2:	Schéma du maillage décalé	68
6.1:	Géométrie de la chambre du premier cas	72
6.2:	Profil de vitesse du jet central	74
6.3:	Profil de vitesse axial du co- courant	74
6.4:	Profil d'Energie cinétique du co- courant	74
6.5:	Profil de Energie cinétique du co- courant	74
6.6:	Profil radial de la température dans différentes sections x dans le champ d'écoulement (sans générateur de turbulence)	76
6.7:	Profil radial de la température dans différentes sections x dans le champ d'écoulement (avec un générateur de turbulence)	77
6.8:	Fraction molaire de l'espèce H <sub>2</sub> dans différentes sections x dans le champ d'écoulement (sans générateur de turbulence)	78
6.9:	Fraction molaire de l'espèce H <sub>2</sub> dans différentes sections x dans le champ d'écoulement (avec un générateur de turbulence)	78
6.10:	Fraction molaire de l'espèce O <sub>2</sub> dans différentes sections x dans le champ d'écoulement (sans générateur de turbulence)	79
6.11:	Fraction molaire de l'espèce O <sub>2</sub> dans différentes sections x dans le champ d'écoulement (avec un générateur de turbulence)	80
6.12:	Fraction molaire de l'espèce H <sub>2</sub> O dans différentes sections x dans le champ d'écoulement (sans générateur de turbulence)	80
6.13:	Fraction molaire de l'espèce H <sub>2</sub> O dans différentes sections x dans le champ d'écoulement (avec un générateur de turbulence)	81
6.14:	Profil radial de l'espèce NO dans différentes sections x dans le champ d'écoulement (sans générateur de turbulence)	82
6.15:	Profil radial de l'espèce NO dans différentes sections x dans le champ d'écoulement (avec générateur de turbulence)	82
6.16:	Configuration géométrique du problème	83
6.17:	Profil de vitesse des jets	84
6.18:	Profil de l'Energie cinétique K des jets	84

6.19:	Profil axiale de la fraction de mélange et la température de la flamme	85
6.20:	Effet de dilution sur la température	86
6.21:	Effet de dilution sur la longueur de la flamme	86
6.22:	Effet de dilution sur la température maximale de la flamme	86
6.23:	Profil de la température sur l'axe de symétrie	87
6.24:	Effet de dilution sur la réduction de NO	88
6.25:	Profil de la fraction massique de H sur l'axe de symétrie	88
6.26:	Profil de la fraction massique de O sur l'axe de symétrie	88
6.27:	Profil de la fraction massique de OH sur l'axe de symétrie	89
6.28:	Profil de la fraction massique de CO sur l'axe de symétrie	89
6.29:	Profil de la fraction massique de HCN sur l'axe de symétrie	90
6.30:	Profil de la fraction massique de NO sur l'axe de symétrie	90
6.31:	Profil de la fraction massique de CO <sub>2</sub> sur l'axe de symétrie	90
6.32:	Effet chimique de l'addition du CO <sub>2</sub> sur le maximum de température dans l'axe de symétrie	92
6.33:	Effet chimique de l'addition du CO <sub>2</sub> sur le maximum des différentes espèces chimiques	
	(a) Fraction massique de H	92
	(b) Fraction massique de OH	92
	(b) Fraction massique de HCO	93
	(c) Fraction massique de NO	93

## Communications et publications

- **Hadef, A.**; Aouachria, Z.; and Mamerie, A. (2012). Modélisation de la formation du NO par le concept de flammelette laminaire d'une flamme de diffusion turbulente H<sub>2</sub>/Air. *2ème Conférence Internationale sur les Energies, Matériaux et Environnement CIEME'2012 Khemis Miliana, 02-03 Décembre.*
- Mamerie, A. ; **Hadef, A.** ; Gahmousse, A. et Gokalp, (2012). I. Etude numérique d'une flamme turbulente pré-mélangée d'un mélange pauvre méthane-hydrogène. *1st International Congress of Naval Aero-Hydrodynamics Oran, 6-7 November.*
- **Hadef, A.**; Aouachria, Z.; (2013). The interactions of the kinetic chemistry and the turbulence on the turbulent diffusion flame. *International Conference on Mathematical Sciences and Statistics. AIP Conference Proceedings 1557, 174-179.*
- **Hadef, A.**; Aouachria, Z.; and Mamerie, A. (2014). Effect of vortexes flow on training NO in a turbulent non premixed flame, *7th International Conference on Thermal Engineering: Theory and Applications Marrakesh-Morocco, May 6-8.*
- **Hadef, A.**; Aouachria, Z.; and Mamerie, A. (2015). Réduction de la formation du NO par un co-courant tourbillonné d'une flamme de diffusion turbulente H<sub>2</sub>-N<sub>2</sub>/air modélisée par le concept de flammelette laminaire. *17èmes Journées Internationales de Thermique, Marseille (France), 28 - 30 Octobre.*
- Mamerie, A.; Tabet, F.; et **Hadef, A.** (2015). Simulation of Biogas Counter Flow Diffusion Flame Under Several Operation Conditions of Composition and Pressure. *International Conference on Sustainable Development Belgrade, Serbia, 12-15 November.*
- **Hadef, A.**; Aouachria, Z.; and Rezgui, Y. (2016). Reduction of no formation by thermal effect of a turbulent diffusion flame H<sub>2</sub>/Air modeled by the concept of laminar flamelet. *Journal of Engineering Science & Technology*, 11(3), 383 – 396.
- **Hadef, A.**; Mamerie, A.; Aouachria, Z., and Tabet, F. (2016). Quantification of emissions in a turbulent diffusion flame applied to a burner, *16' International Conférence On Matériels and Energy, La Rochelle, France, 17-20 May.*
- **Hadef, A.**; Mamerie, A.; Aouachria, Z., and Tabet, F. (Year). Numerical study of the impact of CO<sub>2</sub> dilution on emissions in a turbulent diffusion combustion, *Journal of Engineering Science & Technology*, Vol. XX, No. Y (Year) PPP – QQQ ( Papier en examen).

# 1. Introduction et synthèse bibliographique

Les nouvelles réglementations qui protègent l'environnement exigent des nouvelles technologies pour atteindre une combustion propre et un rendement énergétique élevé. Or les énergies renouvelables sont les seuls qui peuvent atteindre cet objectif, donc, il est primordial d'améliorer l'efficacité des installations énergétiques conventionnelles pour réduire les émissions polluantes (NO<sub>x</sub>, SO<sub>x</sub>, particules de suies etc..) atteindre leurs rendements.

Les installations énergétiques s'opèrent avec des flammes de diffusions turbulentes, où le comburant et les carburant sont injectés séparément, dans ce model l'accrochage de la flamme est difficile à maîtriser, de ce fait la plage de fonctionnement des brûleurs est déterminé par la stabilité de leurs flammes, donc la capacité à rendre stables ces flammes va déterminer en pratique suivant la plage de fonctionnement des brûleurs, une meilleure compréhension des phénomènes instationnaires qui pilotent la stabilisation des flammes en régime de combustion non pré mélangée est essentielle au développement des nouvelles technologies des brûleurs industriels.

La compréhension des phénomènes instationnaires de la flamme de diffusion est importante pour le développement des nouvelles technologies des brûleurs industriels. Dans cette directive, un nouveau régime de fonctionnement des fours à haute énergie qui utilisent des brûleurs régénératif est identifié par Katsuki et Hasegawa , et Weber et al. [1,2] , ils se basent sur la forte recirculation des produits de combustion dans la chambre thermique pour avoir la dilution des réactifs.

Ce régime se caractérise par une absence de flamme visible, une grande homogénéité spatio-temporelle de température sans pics de forte intensité, un faible bruit de combustion dû aux faibles fluctuations de température et de pression et surtout la réduction significative des émissions de NO<sub>x</sub> et de particules Wunning et Wunning , Milani et Saponaro . et Cavaliere et Joannon [3,4,5].

L'apparition de ce nouveau régime de combustion prouve le rôle du préchauffage des gaz et de la dilution par les produits de combustion, où le CO<sub>2</sub> joue un rôle important au point de vue quantité et propriétés physico-chimiques sur la structure interne de la flamme et les quantités des produits de combustion dans les foyers.

Les travaux expérimentaux [6,7,8] et numériques [9,10,11,12] mènent l'accent sur le comportement de flammes non-pré mélangées d'hydrocarbures avec un ajout de CO<sub>2</sub> dans le combustible ou dans le comburant. Généralement le CO<sub>2</sub> est considéré comme un gaz inerte, cependant, des recherches notamment celles développées par Liu et al., Park et al., et Guo et Smallwood [9,10,13], ont montré numériquement qu'il existe une modification passive du schéma cinétique de la réaction. Ces travaux insistent sur la difficulté à discriminer, dans les expériences, les trois voies d'action couplées du CO<sub>2</sub>, tout particulièrement l'impact de la voie 'chimie'.

Pour cette raison, une molécule inerte, marquée X\_CO<sub>2</sub>, est introduite dans le mécanisme réactionnel, qui a les mêmes propriétés physiques que CO<sub>2</sub>, mais sans participer à la réaction chimique. Ainsi, la différence entre l'action de X\_CO<sub>2</sub> et celle du CO<sub>2</sub> est considérée comme résultante du seul effet chimique de CO<sub>2</sub>.

Du point de vue fondamental, en ajoutant le CO<sub>2</sub>, certaines réactions chimiques vont être renforcées, par exemple :  $\text{CO}_2 + \text{H} \rightarrow \text{CO} + \text{OH}$ , si le CO<sub>2</sub> est introduit dans l'air. Néanmoins, la contribution de la chimie est plus faible comparée à celles de la thermique. D'autres travaux ont été menés pour comprendre la dépendance et la réduction des NO<sub>x</sub> dans les flammes de diffusion turbulente H<sub>2</sub>-N<sub>2</sub>/Air par Chen [15], Shudo et al. [16]. Ils ont constaté que les émissions de NO<sub>x</sub> provenant de la combustion d'hydrogène peuvent être réduites par un mélange pauvre, bien que Choudhuri et Gollahalli. [17] aient montré que l'addition de l'hydrogène à un hydrocarbure provoque la diminution de l'espèce CO, mais elle augmente les émissions de NO<sub>x</sub>. Chen et Driscoll [18] ont également constaté que les émissions de NO<sub>x</sub> ainsi que la longueur de la flamme ont été réduites par l'utilisation d'un écoulement d'air tourbillonné.

L'objectif de ce travail est d'apporter une contribution à l'analyse des flammes de diffusion turbulente modélisée par le concept de flammelette laminaire.

Ce genre de flamme a fait l'objet d'un grand nombre d'études aussi bien asymptotiques que numériques et expérimentales.

Le modèle de la flammelette suppose qu'une flamme turbulente est un ensemble de plusieurs flammelettes laminaires, utilisant une cinétique chimique détaillée, les coefficients de transport et les équations de bilan. Avec les résultats obtenus, on crée une bibliothèque de flammelettes pour une large plage de températures et fraction massique des espèces.

La prise en compte dans les calculs des flammes d'une cinétique chimique détaillée faisant intervenir un nombre important d'espèces et de réactions nécessite un temps de calcul très élevé. Pour remédier à ce problème, plusieurs chercheurs se sont penchés sur la question.

Certains d'entre eux ont utilisé des mécanismes réduits qui contiennent un nombre limité d'espèces et de réactions. Pour plus de détails nous nous référons aux travaux de Peters [19,20].

Les travaux de Peters constituent une réduction systématique des schémas cinétiques élémentaires. Les travaux de Pacsko et al. [21], Rogg [22] et Djavdan [23] montrent que l'utilisation de ces mécanismes réduit considérablement le temps de calcul tout en donnant des résultats satisfaisants.

Pour la présente étude nous avons utilisés le mécanisme GRIMec 3.00, qui comprend 54 espèces et 345 réactions

Notre étude se divise en deux parties :

➤ La première partie est consacré sur l'impact de l'effet de l'intensité de turbulence d'un courant d'air sur la structure d'une flamme de diffusion turbulente d'hydrogène mélangé avec de l'azote, relativement à une configuration investie expérimentalement par Hwang et al.[24].

➤ La deuxième partie présente une contribution à la quantification des émissions polluantes d'une flamme de diffusion turbulente méthane/air avec un pourcentage de 0 % à 24 % de

dilution d'air par le  $\text{CO}_2$ ; où le dernier pourcentage représente l'extinction de la flamme ainsi que l'effet chimique de  $\text{CO}_2$ , avec une approche numérique (CFD).

Les études approfondies ainsi que les travaux expérimentaux, ont été étudiés à partir des années 40, relativement au besoin industriel. Damköhler [25] a montré l'influence du nombre de Reynolds sur la vitesse de la flamme en régime turbulent en explorant l'effet de la géométrie.

Hotell et Hawthorne ont démontré que la longueur de la flamme de diffusion turbulente ne dépend pas de la vitesse d'éjection des gaz, contrairement à une flamme de diffusion laminaire [26]; [28]; [29].

Le champ des fractions massiques moyennes et de leurs fluctuations sont modélisés et calculés par l'approche Bilger [27] sans faire appel au taux de réaction, puisque les fractions massiques sont reliées à la fraction de mélange de façon parfaitement déterministe.

Une formule plus ou moins empirique, proposée par Magnussen et Hjertager [28] est largement utilisée dans l'industrie. La modélisation ou le taux moyen de réaction est supposé proportionnel à une « surface moyenne de flamme par unité de volume » a été proposée en 1977 par Marble et Broadwell [29]. C'est le modèle dit « de la flamme cohérente », qui a été ensuite transposé aux flammes de prémélange.

Bray [30] a étudié l'interaction entre la turbulence et la combustion d'un point de vue modélisation. Les effets de la combustion sur la structure de la turbulence et ceux de la turbulence sur les taux de réactions chimiques ont été discutés.

Le problème de fermeture du flux diffusif turbulent et la destruction moléculaire des fluctuations des espèces réactives (ou de la température) en considérant les formes de la PDF (Probability Density Function) pour les vitesses et les concentrations des espèces sont traités par Borghi et Dutouy [31].

Le présent manuscrit est divisé en 6 chapitres.

◆ **Le premier chapitre** englobe une introduction et une synthèse des travaux ainsi que le but de cette étude.

◆ **Le deuxième chapitre** présente des notions sur les flammes, la phénoménologie de la turbulence et de la combustion et leurs interactions, ainsi qu'une présentation du diagramme de la combustion turbulente.

◆ **Le troisième chapitre** est une synthèse des modèles de turbulence et un détail du modèle utilisé avec l'amélioration apportée (correction de Pope).

◆ **Le quatrième chapitre** présente les différentes manières de modéliser la combustion turbulente, il fait le point sur les modèles utilisés (concept de flammelette laminaire), ainsi que la modélisation de la formation du NO et le modèle de rayonnement utilisés dans ce présent travail.

◆ **Le cinquième chapitre** présente la procédure numérique avec laquelle le code utilisé traite les différents problèmes abordés.

◆ **Le dernier chapitre** est consacré au calcul numérique et aux résultats.

*Premier cas :*

- Etude numérique des champs thermiques et des espèces chimiques dominantes d'une flamme de diffusion turbulente  $H_2/Air$  modélisée par le concept de flammelette laminaire avec un générateur de turbulence et sans générateur de turbulence et le rôle de ce dernier sur les différents champs, avec une confrontation aux travaux de Hwang et al.[24].

*Deuxième cas :*

- Etude numérique des champs thermiques et des espèces chimiques dominantes d'une flamme de diffusion turbulente  $CH_4/Air$  modélisée par le concept de flammelette laminaire et l'impact de la dilution de l'air par le  $CO_2$  jusqu'à l'extinction de la flamme sur les champs thermiques et les espèces chimiques dominantes ainsi que le rôle de l'effet chimique.

## Bibliographie

1. Katsuki, M.; et Hasegawa, T. (1998). **The science and technology of combustion in highly preheated air**. Proceedings of the Combustion Institute, 27, 3135–3146.
2. Weber, R.; Verlan, A.D.; Orsino, S.; et Lallement, L. (1999). **On emerging furnace design methodology that provides substantial energy saving and drastic reduction in CO<sub>2</sub> and CO and NO<sub>x</sub> emissions**. Journal of the Institute of Energy, 72,77–83.
3. Wunning, J.A.; et Wunning, J.G. (1997). **Flameless oxidation to reduce thermal NO-formation**. Progress in Energy and Combustion Science, 23, 81–84.
4. Milani, A.; et Saponaro, A. (2001). **Diluted combustion technologies. International Flame Research Foundation**. Combustion Journal, 01,200101.
5. Cavaliere, A.; et Joannon, M. (2004).**Mild combustion**. Progress in Energy and Combustion Science, 30(4), 329–366.
6. Dally, B.B.; Karpetis, A.N.; and Barlow, R.S. (2002). **Structure of turbulent non-premixed jet flames in a diluted hot coflow**. Proceedings of the Combustion Institute, 29, 1147–1154.
7. Oh, K.C.; and Shin, H.D. (2006). **The effect of oxygen and carbon dioxide concentration on soot formation in non-premixed flames**. Fuel, 85, 615–624.
8. Takahashi, F.; Linteris, G.T.; et Katta, V.T. (2007). **Extinguishment mechanisms of coflow diffusion flames in a cup-burner apparatus**. Proceedings of the Combustion Institute, 31, 2721–2729.
9. Liu, F.; Guo, H.; Smallwood, G.J.; et Gulder, O.L.(2001). **The chemical effects of carbon dioxide as an additive in an ethylene diffusion flame : implications for soot and NO<sub>x</sub> formation**. Combustion and Flame, 125,778–787.
10. Park, J.; Hwang, D.J.; Kim, K-T.; Lee, S-B.; et Keel, S-I. (2004). **Evaluation of chemical effects of added CO<sub>2</sub> according to flame location**. International Journal of Energy Research,28, 551–565.

11. Katta, V.R.; Takahashi, F.; et Linteris, G.T. (2004). **Suppression of cup-burner flames using carbon dioxide in microgravity.** *Combustion and Flame*,(137),506-522.
12. Briones, A. M.; Aggarwal, S.K.; et Katta, V. R. (2006). **A numerical investigation of flame liftoff and stabilization and blowout.** *Physics of Fluids*, 18,043603.
13. Guo, H.; et Smallwood, G. (2008). **A numerical study on the influence of CO<sub>2</sub> addition on soot formation in an ethylene/air diffusion flame.** *Combustion Science and Technology*, 180, 1695-1708.
14. Matynia, A.; Delfau, J.-L.; Pillier, L.; et Vovelle, C.(2009). **Comparative study oh the influence of CO<sub>2</sub> and H<sub>2</sub>O on the chemical structure of lean and rich methane-air flames at atmospheric pressure.** *Combustion, Explosion, and Shock Waves*, (45), 635-645.
15. Chen, R.H.(1998). **A parametric study of NO<sub>2</sub> emission from turbulent H<sub>2</sub> and CH<sub>4</sub> jet diffusion flames.** *Combust and flame*.(112),188-198.
16. Shudoa T.; Omorib, K.; et Hiyama. O.(2008). **NO<sub>x</sub> reduction and NO<sub>2</sub> emission characteristics in rich-lean combustion of hydrogen.** *International Journal of hydrogen energy* 33, 4689-4693.
17. Choudhuri, A.R.; et Gollahalli, S.R. (2003). **Characteristics of hydrogene hydrocarbon composite fuel turbulent jet flames.** *International Journal of hydrogen energy*,28(4): 445-454.
18. Chen, R-H.; et Driscoll, J. F.(1990).**Nitric Oxide Levels of Jet Diffusion Flames : Effects of Coaxial Air and Other Mixing Parameters.** *Proceding Combustion Institute*, (23),281-288.
19. Peters, N. (1985). **Numerical and asymptotic on a analysis on a systematically reduced reaction schemes for hydrocarbon flames.** *Numerical Simulation of combustion*, Berlin.
20. Peters, N. (1988).**Laminar flamelet concepts in turbulent combustion.** *Twenty-First Symposuim International on Combustion* ,1231-1250.
21. Pacsko, G.; Lefdal, P.M.; et Peters, N. (1986).**Reduced reaction schemes for methane, methanol and propane flames.** *21 Symposium International on Combustion*,739-748.

22. Rogg, B. (1988). **Numerical analysis of two-dimensional axisymmetric, laminar jet diffusion flames.** Mathematical modelling in combustion and Related Topics, 551-560.
23. Djavdan, E. (1990). **Etude numérique et expérimentale d'une flamme étirée de Propane-air.** Thèse de Doctorat, École centrale Paris.
24. Hwang, C-H.; Seungro, L.; et Lee, C-E. (2008). **The effect of turbulence intensity of ambient air flow on NO<sub>x</sub> emissions in H<sub>2</sub>/air non premixed jet flames.** International Journal of Hydrogen Energy, 33(2), 832-841.
25. Damkohler, G. (1947). **The Effect of Turbulence on the Flame Velocity in a Gas Mixture.** English translation. NACA TM 1112,
26. Hotell, H.C.; et Hawthorne, W.R. (1949). **Combustion and Flame and Explosion Phenomena.** *Third Symposium on Combustion*, 254.
27. Bilger, R.W.(1976), **Turbulent jet diffusion flames.** Progress. Energy. Combustion science, (1),87-109.
28. Magnussen, B. et Hjertager, B.H.(1976), **On mathematical modelling of turbulen.** 16th Symposium International on Combustion, 719-729.
29. Marble, F.; et Broadwell, J. (1977). **The coherent flame model for turbulent chemical reactions.** Technical report TRW, Publisher, NTIS, 1982.
30. Bray, K.N.C., (1979). **The interaction between turbulence and combustion.** 17th symposium (international) on Combustion , 223-233.
31. Borghi.R et Dutoya.D (1979). **On the scales of fluctuations in Turbulent Combustion,** 17'h symposium (International) on Combustion, 235-244.

## 2. Notions sur les flammes et régime de combustion

Les flammes non pré-mélangées, appelées également flammes de diffusion, sont couramment présentées dans les brûleurs industriels, les foyers de turbomachines et les moteurs à combustion interne. Elles offrent une sécurité accrue par rapport aux flammes pré-mélangées car le combustible et le comburant sont amenés séparément au niveau du brûleur, limitant ainsi les risques d'explosion ou de retour de flamme. D'autre part, ces flammes permettent une stabilisation relativement aisée pour une large gamme de débit que ce soit du combustible ou du comburant. Par ailleurs, ces flammes permettent de réaliser des combustions diphasiques (liquide-gaz). Ceci représente une caractéristique importante ce qui permet d'augmenter leur rendement notamment dans les moteurs fusées.

### 2.1 Définitions

Dans ce type de flamme de diffusion turbulente, le combustible et le comburant sont amenés séparément au niveau du brûleur, par conséquent la diffusion des flammes de pré mélange et de mélange du combustible et de l'oxydant ainsi que la réaction chimique ont lieu simultanément. Ceci entraîne une interaction entre deux phénomènes complexes que sont le mélange, qui est un phénomène dynamique et diffusif et la combustion, quant à elle, est un phénomène chimique. La Figure 1 présente l'évolution de la fraction molaire de différentes espèces en fonction de la fraction de mélange, pour une flamme de diffusion hydrogène/air ( $H_2$ /air). Ce type d'évolution est typique d'une flamme de diffusion [1].

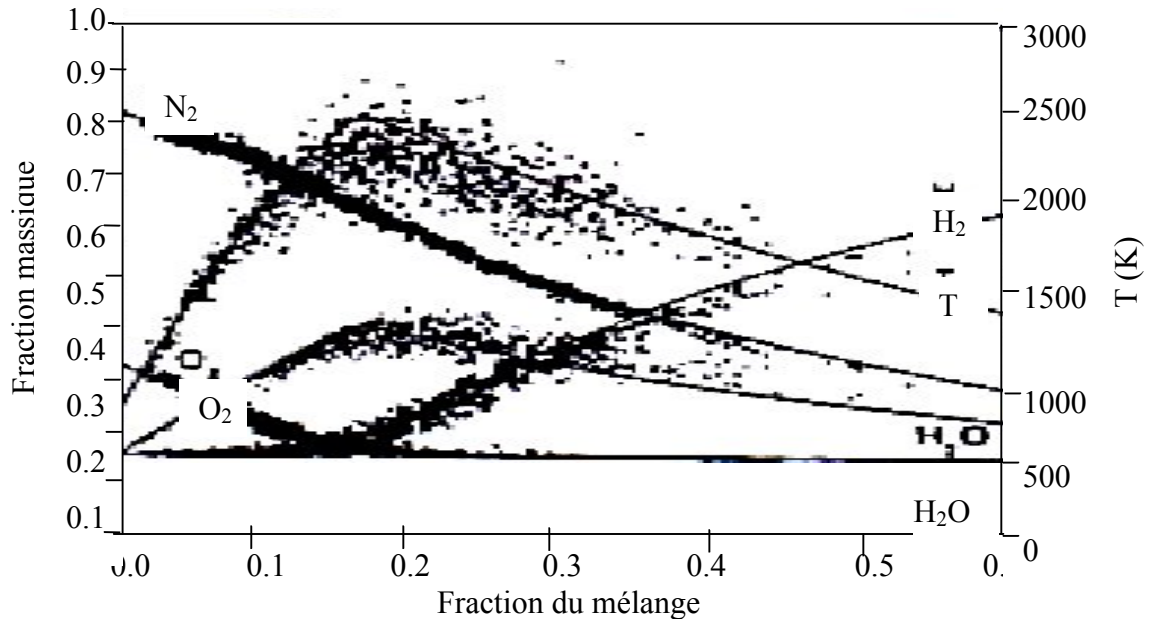


Figure 2.1 Fraction molaire et la température pour différentes espèces en fonction de la fraction de mélange. Mesure par diffusion Raman dans une flamme  $H_2$ /air [1]

Nous observons une diminution de la quantité du combustible et du comburant à l'approche de la zone de réaction qui se situe autour de la fraction de mélange voisine 0.15, Figure.2.1. Cette zone est, par ailleurs, le siège d'un dégagement de chaleur important.

Les lignes pleines représentent les valeurs correspondant à une hypothèse de « chimie à l'équilibre ». Par rapport à cette hypothèse, nous observons un écart assez important pour de nombreux points de mesure représenté par une sorte de nuage des points.

Tout d'abord à la vue de ce diagramme, on remarque la dissymétrie du champ thermique et des fractions molaires par rapport à la zone de réaction. Ceci résulte des diffusivités différentes des différents gaz mis en jeux dans cette réaction. De plus, on observe une probabilité de présence non négligeable du combustible et du comburant après la réaction. Ceci sera une des limitations de la simulation dans le cas d'une chimie infiniment rapide. Cette probabilité, de présence non nulle, caractérise le phénomène de mélange au niveau de la zone de réaction chimique. A la vue de ces profils, nous voyons qu'une des caractéristiques des flammes de diffusion est la mise en

compétition de plusieurs phénomènes physiques tels que la diffusion, le processus de mélange et la cinétique chimique.

Il existe plusieurs géométries de brûleurs pour obtenir une flamme de diffusion (brûleurs à tourbillons ou à remous, Bluff body, jets séparés...). La plus simple est la flamme à jet, qui est constituée par un jet de gaz à forte vitesse dans un écoulement de gaz comburant à vitesse plus faible.

## 2.2. Caractéristiques des flammes de diffusion

Au niveau de l'étude des flammes non pré-mélangées nous pouvons, en général, différencier des phénomènes propres aux flammes de diffusion et des phénomènes liés à chaque configuration de flamme. Pour toutes les flammes non pré-mélangées, la combustion ne va provenir d'un mélange entre le combustible et le comburant que si des conditions de richesse, de température, de pression et de vitesse sont réunies. Cette combustion donnera lieu à une flamme ayant une certaine épaisseur, qui variera en fonction des conditions d'injection, de l'emplacement de ce dernier dans la flamme et du type du combustible utilisé. Cette flamme séparera, par ailleurs, deux zones de convection et de diffusion, où se produira le préchauffage des gaz, l'apport des gaz frais et l'évacuation des gaz brûlés. A l'inverse des caractéristiques citées ci-dessus certaines caractéristiques sont intimement liées à une flamme en particulier. Cette particularité est définie par la géométrie de l'injecteur, les types de combustible et de comburant entrant en jeu dans la combustion ainsi que la vitesse d'éjection des gaz. Ces caractéristiques seront les points essentiels sur lesquels portera notre étude. Ce chapitre portera donc sur la définition et les connaissances actuelles de ces différents points.

La première de ces caractéristiques concerne le régime de combustion de la flamme (flammelette, flammelette plissées, flammelette avec extinction locale) [2, 3]. Cette caractéristique est primordiale d'une part, dans l'optique d'une modélisation qui ne pourra pas être abordée de la même façon en fonction du régime de fonctionnement des brûleurs et, d'autre part, pour des raisons de sécurité et de rendement lors de l'utilisation. Il sera en effet inutile voire dangereux d'utiliser une flamme dans

un régime de fonctionnement à nombreuses extinctions. Ce dernier peut évacuer de gaz imbrulés ce qui génère une diminution du rendement de combustion et une forte émission de polluants.

Une seconde caractéristique très importante des flammes non pré-mélangées concerne leur mode de stabilisation [4-5]. Celui-ci aura des répercussions sur la globalité non seulement de la flamme, mais aussi de toute la structure environnante (injecteur, chambre de combustion, moteur).

Le premier critère de stabilité pour une flamme sera son aptitude à conserver (un lift) relativement stable pour une gamme de débit important, et ainsi éviter les risques de soufflage. De plus une flamme que l'on pourra qualifier correctement stabilisée ne présentera pas une déstabilisation globale. Enfin, il est nécessaire que la stabilisation se fasse relativement loin de l'injecteur, de manière à ne pas entraîner sa surchauffe excessive, notamment dans le cas des flammes de très forte puissance. Par ailleurs, les phénomènes de stabilisation des flammes sont une des caractéristiques les plus difficiles à simuler numériquement. En effet, dans les zones de flammes les temps caractéristiques de la combustion (temps chimique, temps de mélange), ont le même ordre de grandeur. il est donc très important, pour modéliser ce problème, d'obtenir un maximum de renseignements aidant à la compréhension de ces phénomènes de stabilisation.

Une autre caractéristique propre à chaque flamme est l'interaction entre la flamme et la turbulence. En effet, la structure d'une flamme peut être modifiée par la turbulence, que ce soit à grande ou à petite Echelle. Les structures de la turbulence entraînent des phénomènes d'étirement et de compression du front de flamme, qui peuvent épaissir ou éteindre la flamme à l'endroit du passage d'une telle structure. Les grosses structures pourront modifier de façon très importante la flamme en la déformant; voire en créant des zones d'extinction locale. Les petites structures pourront, quant à elles, entraîner une modification intrinsèque de la flamme. En effet, si leurs tailles sont du même ordre de grandeur (voire plus petite que l'épaisseur de la flamme) elles agiront à l'intérieur de la flamme. Cela revient à dire qu'une structure suffisamment petite pourra entrer directement dans le front de flamme pour modifier le mélange et donc la chimie à l'intérieur même de celui-ci.

Nous voyons donc qu'il est très intéressant, voir nécessaire, d'obtenir des résultats expérimentaux aussi bien quantitatifs que qualitatifs sur ces différents paramètres dans l'optique d'aider à une meilleure compréhension de la flamme non pré-mélangée hydrogène/oxygène en vue d'une meilleure modélisation représentative. Une modélisation qui ne pourra s'effectuer correctement, en raison des hypothèses propres à chaque modèle, que si ceux-ci sont capables de prendre en compte les caractéristiques intrinsèques de la flamme (plissement, extinction), qui peuvent, dans certains cas, être mises à jour à l'aide de moyens expérimentaux.

### 2.3 Structure interne d'une flamme de diffusion

Pour une flamme de diffusion, l'oxydant et le carburant sont séparés en des zones parfaitement distinctes de préchauffage avant de réagir par la zone de réaction. La Figure 2.2 représente une vue simplifiée d'une flamme de diffusion. Dans ce modèle de flamme, la combustion est essentiellement pilotée par la diffusion des réactifs l'un dans l'autre. La flamme va se développer à l'interface entre les deux réactifs, à la stœchiométrie et les produits de combustion sont ensuite évacués par diffusion moléculaire de part et d'autre de la zone de réaction.

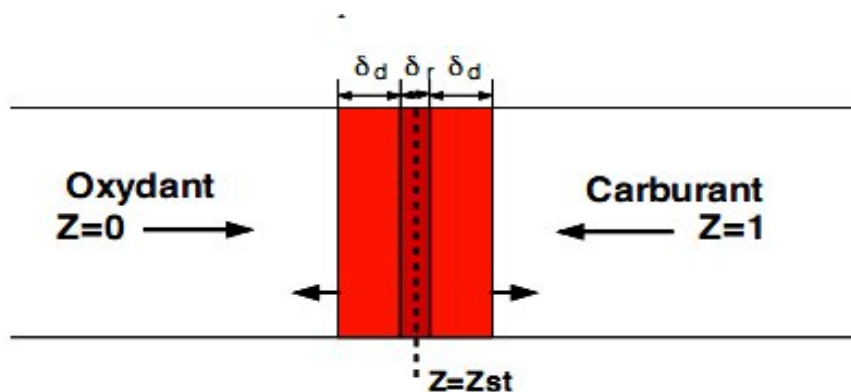


Figure 2.2 Représentation schématique d'une flamme de diffusion laminaire.

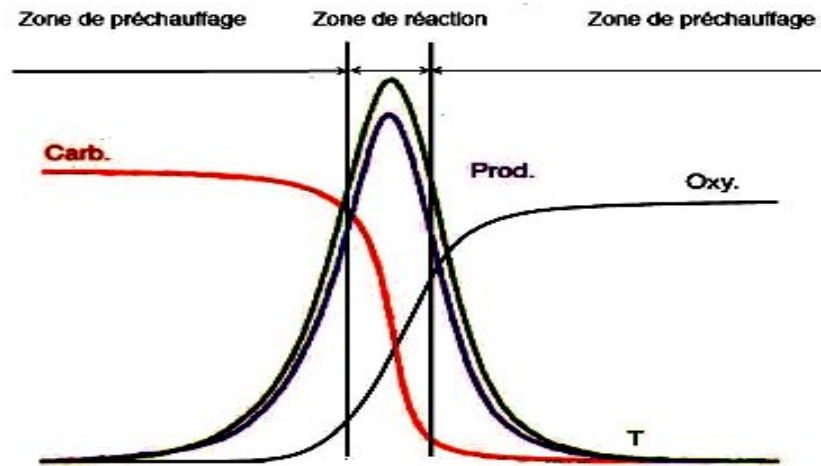


Figure 2.3 Représentation des profils de carburant, Oxydant et Température à travers une flamme de diffusion classique.

La flamme de diffusion schématisée, Figures 2.2 et 2.3, met en évidence l'existence de trois zones :

➤ La première zone, localisée au centre de la flamme, est la zone de réaction. Elle se caractérise par un pic des termes sources chimiques et thermique: c'est là que se déroulent les réactions chimiques mettant en jeu les réactifs et les produits de combustion principaux. Dans cette zone, le carburant et l'oxydant alimentant la flamme sont mélangés à l'échelle moléculaire avant de réagir.

➤ La seconde et la troisième zone, entourant la zone de réaction, est la région de diffusion des espèces où les réactifs sont présents de chaque côté de la flamme et sont mélangés aux produits de combustion évacués par diffusion moléculaire. Dans cette région, on note une élévation progressive de la température des gaz, provoquée par la diffusion thermique et la dilution des réactants par les gaz brûlés. Sous l'hypothèse d'équidiffusion, la zone de diffusion des espèces et celle de la température sont superposées et symétriques ;

➤ Pour finir, on trouve de part et d'autre des zones de diffusion les deux écoulements de gaz frais alimentant la flamme en carburant et en oxydant.

Ces observations montrent que les flammes de diffusion résultent de la compétition entre les processus chimiques et le processus diffusif moléculaire des espèces. On parle donc de la structure

de flamme contrôlée uniquement par le rapport entre les temps caractéristiques de la chimie et de la diffusion. Contrairement aux flammes pré-mélangées, le front de la flamme de diffusion ne se propage pas au sein de l'écoulement mais reste fixé autour de l'iso-surface de mélange stoechiométrique.

## 2.4 Interactions flamme/turbulence et digramme de combustion

### 2.4.1 Flammes turbulentes pré-mélangées

De nombreux auteurs se sont intéressés à l'influence de la turbulence sur la structure des flammes, notamment Borghi [6] et Peters [9]. Les travaux les plus récents utilisent la DNS pour étudier en détail ces interactions Poinso et al. [8], et Poinso et Veynante [13].

L'influence de la turbulence sur la chimie (et réciproquement) est contrôlée par les temps caractéristiques de ces deux phénomènes. Le temps caractéristique de la chimie est défini généralement en fonction de la vitesse et de l'épaisseur de la flamme laminaire :

$$\tau_c = \frac{\delta_L^0}{S_L^0} \quad (2.1)$$

Le temps caractéristique de la turbulence peut être défini comme le rapport entre une échelle de longueur de la turbulence et la fluctuation de vitesse associée. On obtient ainsi différents temps correspondant aux différentes échelles caractéristiques des tourbillons. Par exemple, suivant l'échelle de Kolmogorov  $\eta_K$  représentant la taille des plus petits tourbillons, il vient :

$$\tau_{t,\eta_K} = \frac{\eta_K}{u'_{\eta_K}} \quad (2.2)$$

Si l'on considère maintenant les plus grandes structures de l'écoulement décrit par l'échelle intégrale  $l_t$ , on trouve :

$$\tau_{t,l_t} = \frac{l_t}{u_t'} \quad (2.3)$$

Les rapports entre ces différents temps définissent des nombres sans dimension permettant de caractériser les différents régimes de combustion turbulente. Le nombre de Damköhler est défini comme le rapport entre le temps lié à l'échelle intégrale de la turbulence et le temps chimique, alors que le nombre de Karlovitz est égal au rapport entre le temps chimique et le temps lié à l'échelle de Kolmogorov.

$$Da = \frac{\tau_{t,l_t}}{\tau_c} \quad (2.4)$$

$$Ka = \frac{\tau_c}{\tau_{t,K}} \quad (2.5)$$

Le nombre de Reynolds turbulent,  $Re_t = \frac{u_t' l_t}{\nu}$ , peut alors être réécrit en fonction de ces deux nombres adimensionnels :

Suivant les valeurs prises par  $Da$  et  $Ka$ , il est possible d'identifier différents régimes de combustion. Ces régimes peuvent ensuite être classés au sein d'un diagramme en fonction des rapports des échelles de longueur et de vitesse, ou en fonction des nombres de Damköhler et de Karlovitz [6,7]. La Figure (2.4) présente un exemple de diagramme de combustion turbulente proposé par Peters [9]. On retrouve en abscisse le rapport des longueurs  $\frac{l_t}{\delta_L}$ , et en ordonnée le

rapport des vitesses  $\frac{u_t'}{\delta_L}$ . La figure 2.4 permet de distinguer quatre principaux régimes pour la combustion pré-mélangée :

- le premier régime correspond à un nombre de Karlovitz inférieur à 1 et à un nombre de Damköhler supérieur à 1. C'est le régime des flammelettes ou régime des flammes minces. Les plus petites structures de la turbulence sont ici trop petites pour pouvoir pénétrer le front de

flamme et sont donc incapables de modifier sa structure interne. Suivant la valeur du rapport des

vitesses  $\frac{u'_t}{S_L^0}$ , deux régions peuvent être distinguées :

✓ pour  $\frac{u'_t}{S_L^0} < 1$ , la turbulence n'a d'effet que sur la structure externe de la flamme en la plissant

(c'est le régime des flammelettes plissées),

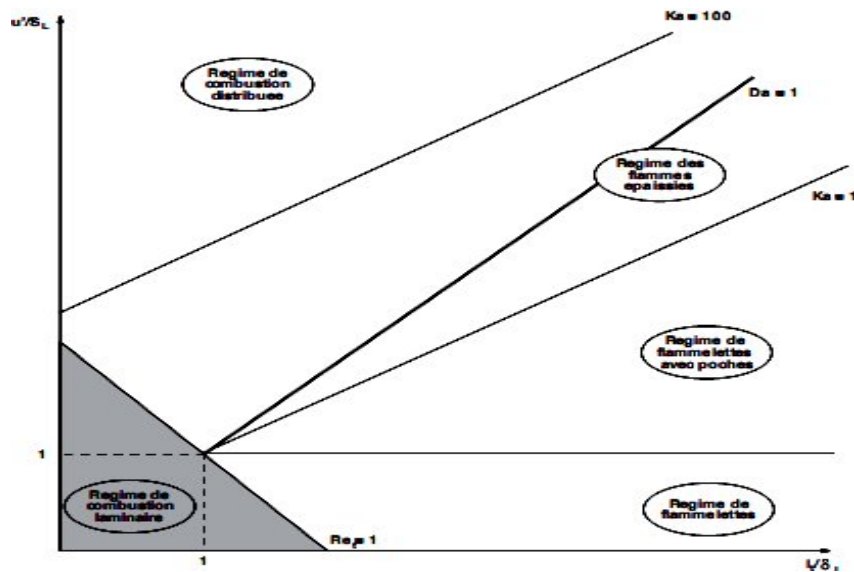


Figure 2.4 Diagramme de combustion turbulente pré-mélangée [9].

✓ pour  $\frac{u'_t}{S_L^0} > 1$ , l'intensité de la turbulence plisse très fortement le front de flamme, ce qui peut conduire à la formation de poches (c'est le régime des flammelettes avec poches) ;

- le second régime est défini par un Karlovitz supérieur à 1, et un Damköhler lui aussi supérieur à 1 (ou faiblement inférieur à 1). On se situe alors dans le domaine des flammes épaissies. Dans cette région, les plus petits tourbillons possèdent une taille caractéristique inférieure à l'épaisseur de flamme, ce qui leur permet de pénétrer la zone de préchauffage (mais pas la zone de réaction). La structure interne de la flamme est modifiée car les petits tourbillons épaississent la flamme en accroissant la diffusion thermique et moléculaire. À noter que pour des nombres de Karlovitz supérieurs à 1, des zones d'extinction locales peuvent également être observées. Peters [9] introduit une limite en  $Ka = 100$ , délimitant la région où les plus petits tourbillons de l'écoulement

deviennent plus petits que l'épaisseur de la zone de réaction (supposée être 10 fois plus petite que l'épaisseur de flamme). Cette ligne représente la limite supérieure du régime des flammes épaissies.

- le dernier régime est caractérisé par un Karlovitz supérieur à 100, et un nombre de Damköhler très inférieur à 1. C'est le régime de combustion distribuée. Dans ce cas, les plus petites structures turbulentes ont une taille inférieure à l'épaisseur de la zone de réaction et sont donc capables d'altérer profondément celle-ci. La chimie est fortement perturbée par la turbulence, et on ne peut plus réellement distinguer de front de flamme. Le mélange turbulent est très rapide comparé aux mécanismes chimiques, c'est pourquoi on parle souvent de réacteur parfaitement mélangé.

La limite correspondant à  $Ka = 1$ , appelée critère de Klimov-Williams, définit la transition entre le régime des flammelettes et le régime des flammes épaissies. Différents travaux ont été réalisés dans le but de caractériser plus précisément la position de cette transition [8,11]. Il est apparu en particulier que le régime des flammelettes peut se prolonger au delà de cette limite. Ceci est principalement dû au fait que le critère de Klimov-Williams suppose que les tourbillons à l'échelle de Kolmogorov soient capables d'altérer la flamme turbulente. Or, ceux-ci ont une durée de vie généralement trop courte pour affecter efficacement la flamme. En fait, l'échelle caractéristique des plus petits tourbillons pouvant altérer la flamme est l'échelle de Gibbs, évaluée par Peters [7] :

$$l_G \approx \frac{(S_L^0)^3}{\varepsilon} \quad (2.6)$$

### 2.4.2 Flammes turbulentes non pré-mélangées

De la même manière, pour ce type de flammes, il est possible d'identifier différents régimes de combustion distincts en comparant les échelles de longueur et de temps caractéristiques des flammes à celles de la turbulence. Lorsque l'on s'intéresse à de telles flammes, la définition formelle de ces échelles présente certaines difficultés. En effet, contrairement au cas précédent, le front de flamme ne se propage pas; ce qui rend impossible la définition d'une vitesse de propagation. De plus, l'épaisseur de la zone de réaction dépend fortement des conditions de

l'écoulement. Ainsi, les échelles de la flamme non pré-mélangée sont liées aux phénomènes diffusifs, notamment via le taux de dissipation scalaire de la fraction de mélange  $Z$  à la stoechiométrie. Un temps caractéristique peut, par exemple, être obtenu suivant :

$$\tau_c = \frac{l}{\chi} \quad (2.7)$$

Où  $\chi$  est le taux de dissipation scalaire.

Si cela s'avère nécessaire, un temps chimique  $\tau_c$  peut être obtenu dans le cadre d'une chimie globale, à partir du développement asymptotique des taux de réactions. Cuenot et Poinso [12] se basent sur des résultats de calculs DNS pour tracer un diagramme représentant les différents régimes de combustion non pré-mélangée qui peuvent être rencontrés en pratique. Une représentation simplifiée de ce diagramme, tracé en fonction du nombre de Dämkohler de la flamme et du nombre Reynolds turbulent, est schématisée sur la figure 2.5. On y distingue quatre domaines séparés par trois courbes correspondant à des nombre de Damköhler diffusifs constants: la limite d'extinction est représentée par la droite  $Da = Da^{ext}$  et la limite du régime de flammelettes par la droite  $Da = Da^{LFA}$  (LFA pour "Laminar Flamelet Assumption").

- Le premier domaine correspond à des valeurs du nombre de Reynolds turbulent inférieures à 1. Dans cette zone, l'écoulement reste laminaire (les flammes possèdent donc une structure laminaire).
- Le second domaine est défini par  $Re_t > 1$  et  $Da > Da^{LFA}$ . Dans cette zone, l'hypothèse de flammelettes laminaires est vérifiée. Ainsi, la zone de réaction de la flamme est considérée comme mince et le temps caractéristique de la chimie est négligeable devant les échelles de temps de la turbulence. On peut alors considérer la flamme turbulente comme étant constituée d'une collection de flammelettes, ce qui confère localement à la flamme turbulente les mêmes propriétés qu'une flamme laminaire.
- La troisième zone est définie pour des nombres de Damköhler compris entre  $Da^{LFA}$  et  $Da^{ext}$ . Les temps caractéristiques de la chimie ne sont plus négligeables devant les temps de la

turbulence. Des effets liés à l'instationnarité de l'écoulement peuvent alors apparaître, modifiant ainsi le comportement de la flamme. L'hypothèse de flammelettes n'est donc plus valable.

- Dans la dernière région, délimitée par  $D < Da^{ext}$ , des extinctions locales (« quenching ») peuvent être observées le long de la flamme. Lorsque le nombre de Damköhler est encore augmenté, c'est toute la flamme qui s'éteint. Ce régime de combustion est caractérisé par de fortes instabilités.

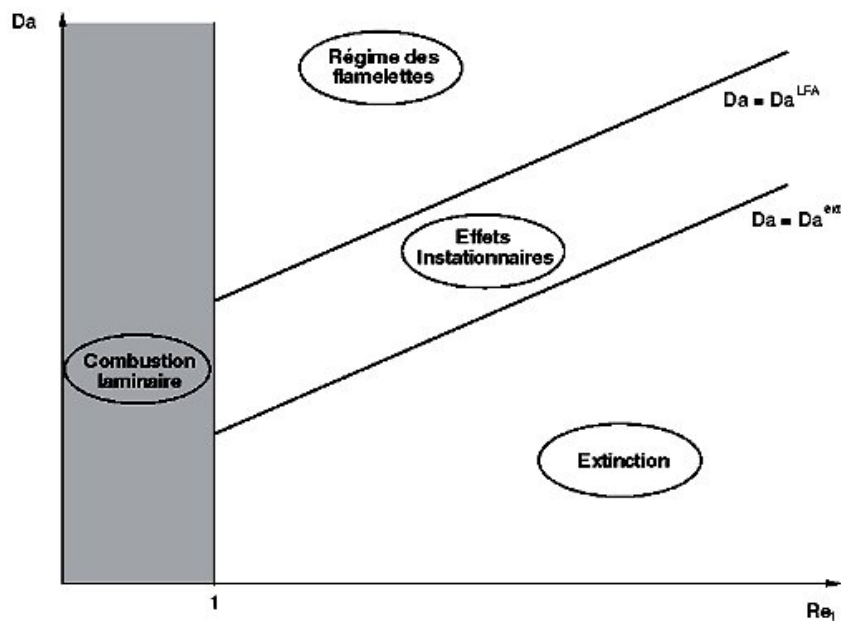


Figure 2.5 Représentation schématique des différents régimes de combustion turbulente non-prémélangée [12,13]

Ce diagramme permet de se représenter les différents régimes rencontrés en combustion turbulente non prémélangée. Cependant, de telles flammes sont très dépendantes des conditions de l'écoulement externe (richesse, débit, pression...) et le diagramme présenté ne permet pas de définir de manière quantitative les différents régimes rencontrés. En particulier les bornes de ceux-ci sont susceptibles de varier fortement suivant le point de fonctionnement étudié.

## Bibliographie

1. Barlow, R. S.; Dibble, R. W. ; Chen, J. Y. et Lucht, R. P. (1990). **Effect of Damkholder Number on super-equilibrium OH concentration in turbulent non premixed jet flames**, *Combustion and Flame*, 82, 235-251.
2. Chen, Y-C. et Mansour, M. S. (1996). **Measurements of the detailed flame structure in turbulent H<sub>2</sub>-Ar jet diffusion flame with line-Raman/Rayleigh/LIPF-OH technique**. Twenty-Sixth Symposium (International) on Combustion/The Combustion Institute, 97-103
3. Ratner, A.; Driscoll, J. F.; Donbar, J. M.; Carter C. D.; et Mullin, J. A. (2000). **Reaction Zone Structure of None premixed Turbulent Flames in the "Intensely Wrinkled" Regime**. *Proceedings of the Combustion Institute*, (28)245-252.
4. Fumiaki, T.; John Schmoll, W. et Katta, V. R. (1998). **Attachment Mechanisms of Diffusion Flames**. Twenty-Seventh Symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute, 27(1),675-684.
5. Richard C., Miake-Lye, R.C.; et Hammer, J. A. (1988). **Lifted turbulent jet flames: A stability criterion based on the large-scale structure**. Twenty-Second Symposium (International) on Combustion, 817-824.
6. Borghi, R. (1984). **Mise au point sur la structure des flammes turbulentes**. *Journal de chimie physique*.6, 361–370.
7. Peters, N. (1988). **Laminar flamelet concepts in turbulent combustion**. Twenty-First Symposium (International on Combustion),1, 1231-1250 .
8. Poinso, T.; Veynante, D.; et Candel, S. (1991). **Quenching processes and premixed turbulent combustion diagrams**. *Journal of Fluid Mechanics*, (228), 561–606.
9. Peters, N. (1999). **The turbulent burning velocity for large-scale and small-scale turbulence**. *Journal of Fluid Mechanics*, 384(01), 107–132.

10. Meneveau, C.; et Poinso, T. (1991). **Stretching and quenching of flamelets in premixed turbulent combustion.** *Combustion and Flame*, (86), 311-332.
11. Abdel-Gayed, R. G.; et Bradley, D. (1989). **Combustion regimes and the straining of turbulent premixed flames.** *Combustion and flame*, (76), 213-218.
12. Cuenot, B.; et Poinso, T. (1994). **Effects of curvature and unsteadiness in diffusion flames. Implications for turbulent diffusion flames.**
13. Poinso, T.; et Veynante, D. (2005). **Theoretical and numerical combustion.** R.T. Edwards

### 3. Modélisation de l'écoulement turbulent

La turbulence est un phénomène complexe qui est encore loin d'être maîtrisé, le nombre de Reynolds, représentant le rapport entre les forces d'inertie et les forces de frottement qui s'exercent sur un fluide, Il permet de caractériser le régime d'écoulement. Pour de plus grands nombres de Reynolds et à partir d'un certain seuil, des instabilités apparaissent et l'écoulement semble désordonné. Les fluctuations spatiales et temporelles des différentes grandeurs physiques du fluide sont d'autant plus irrégulières que la vitesse est élevée. la turbulence est difficilement prévisible puisque une faible variation des conditions aux limites de l'écoulement peut provoquer des modifications importantes des diverses grandeurs. Ce phénomène est à caractère tridimensionnel, irrégulier dans l'espace et dans le temps, rotationnel, diffusant fortement toute quantité transportée, et dissipant de façon importante l'énergie cinétique sous forme de chaleur.

Au sein d'un écoulement turbulent, plusieurs structures de tailles et de fréquences différentes coexistent. Les structures porteuses d'énergie cinétique sont des grandes structures qui peuvent être assimilées à de gros tourbillons; leurs dimensions peuvent atteindre l'ordre de grandeur du domaine occupé par l'écoulement. La viscosité moléculaire n'y joue aucun rôle, l'énergie cinétique est généralement produite par les gradients de vitesse de l'écoulement moyen. Ces grandes structures, soumises au phénomène d'étirement tourbillonnaire qui donnent naissance à des structures plus petites tout en leur transférant une partie de leur énergie [1]. Ce processus se répète et, au dessous d'une certaine échelle de longueur, la viscosité moléculaire joue un rôle important; l'énergie cinétique turbulente, transférée des grandes structures vers les plus petites, est dissipée sous forme de chaleur. Ce processus de transfert est appelé "cascade d'énergie", dont le développement est principalement dû à Kolmogorov (1941).

Dans la plupart des systèmes de combustion du domaine industriel, le type de régime d'écoulement observé est turbulent et interagit avec la combustion. La combustion turbulente résulte de cette interaction entre deux phénomènes complexes ayant lieu à des échelles de temps très faibles. En mécanique des fluides numérique (CFD, Computational Fluid Dynamics en anglais) pour modéliser numériquement les phénomènes liés à la combustion turbulente, on peut distinguer trois degrés de résolution des équations des bilans moyens [2] ou appelées aussi équations de l'aérothermochimie (Figure.3.1).

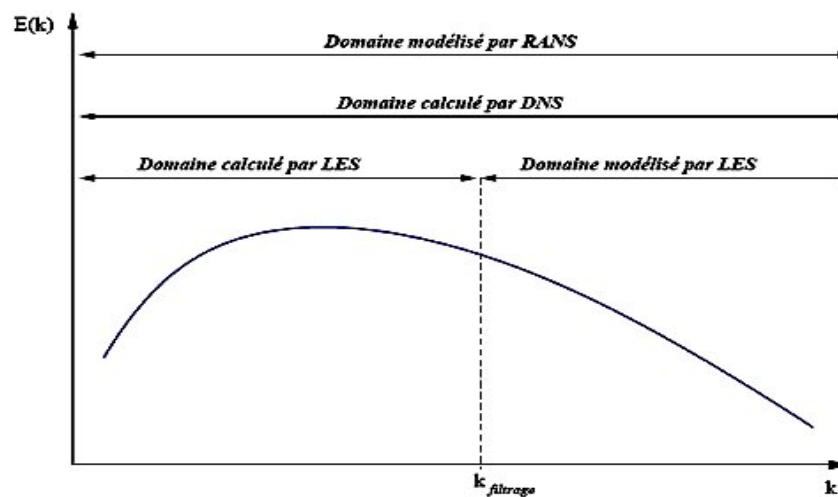
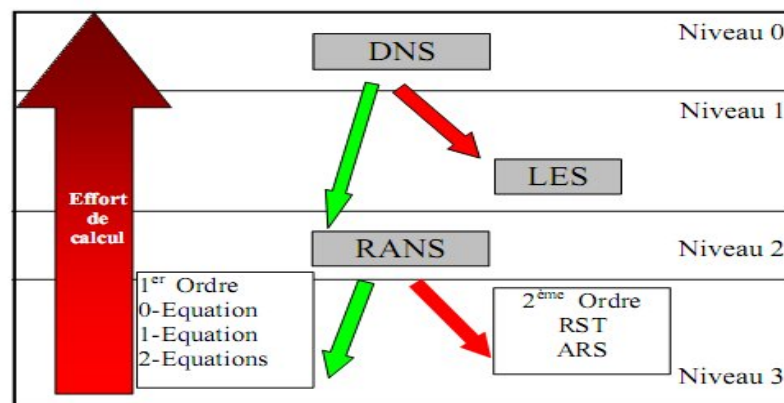


Figure 3.1 : Domaines fréquentiels du spectre d'énergie turbulente calculés et/ou modélisés par la méthode RANS, LES et DNS [2]

Le premier degré, le plus grossier, est celui utilisant la moyenne au sens de Reynolds de l'équation de Navier Stokes (RANS, Reynolds Averaged Navier-Stokes). Ce modèle s'appuie sur une résolution des valeurs moyennes des grandeurs physiques de la combustion turbulente, en utilisant des modèles de fermetures pour les équations de conservation formulées en valeurs moyennes, seuls les champs moyens sont résolus. Les estimations des grandeurs physiques d'un problème correspondent à leur moyenne temporelle dans un écoulement stationnaire ou périodique (moyenne sur plusieurs cycles). Le deuxième degré de résolution correspond à des simulations numériques faites à l'échelle des plus grands tourbillons de l'écoulement turbulent; c'est la simulation aux grandes échelles (Large Eddy Simulation: LES). Les équations ne sont

résolues numériquement que pour les grandes échelles de la turbulence repérées par une méthode de filtrage, alors que les effets dus aux plus petites échelles sont représentés à l'aide de modèles de fermeture adaptés. Les modèles de fermeture RANS ou LES peuvent être obtenus en étudiant les phénomènes à modéliser par simulation numérique directe (Direct Numerical Simulation: DNS). Dans ces simulations, les équations de l'aérothermochimie sont directement résolues à chaque instant, sans nécessiter de modèle approché pour la turbulence, et toutes les échelles et les variations des grandeurs physiques de la combustion turbulente ont été calculées. Ce type de simulation s'est beaucoup développé durant ces dernières années mais reste appliqué à des géométries de petites dimensions pour des configurations basiques à cause de la lourdeur en temps de calcul puisque le nombre de points où la solution doit être capté est une puissance de 9/4 du nombre de Reynolds [2]. Le calcul DNS a permis de mieux comprendre les mécanismes de la combustion turbulente à petite échelle et de générer des modèles de fermetures adéquats pour le RANS et la LES. Un aperçu des classes de modèles de turbulence est montré par la figure 3.2



DNS: Direct Numerical Simulation.

LES: Large Eddy Simulation.

RANS: Reynolds Averaged Navier Stokes equations

1<sup>er</sup> Ordre : Fermetures du premier ordre. 2<sup>ème</sup> Ordre : Fermetures du deuxième ordre.

RST: Reynolds Stress Transport models. ARS: Algebraic Reynolds Stress models.

0-, 1-, 2-Eq. = Zéro- (algébrique), une, deux équations (modèle à).

Figure 3.2 Aperçu sur les différents modèles de turbulence

### 3-1- Equations de Navier-Stokes moyennes

La turbulence est un phénomène stochastique, une description statistique de la turbulence est nécessaire. Du point de vue engineering, seulement la moyenne et la variance d'une quantité sont d'un intérêt primaire. Toutes les quantités fluctuantes sont divisées en une partie moyenne et une partie fluctuante ainsi:

$$U = \bar{U} + U' \quad (3.1)$$

Où la barre désigne la moyenne de la quantité  $U$  et la prime indique la fluctuation. Les quantités moyennes sont calculées par une moyenne d'ensemble sur toutes les réalisations  $U_k, k = 1, 2, \dots, n$  de cette quantité à un point fixe de l'espace et du temps.

$$\bar{U}(x, t) = \lim_{n \rightarrow \infty} \left( \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n U_k(x, t) \right) \quad (3.2)$$

Dans les écoulements avec des gradients importants de densité, une moyenne pondérée par la masse, dite moyenne de Favre est souvent préférée [3], elle est définie par:

$$U = \tilde{U} + U'' \quad (3.3)$$

avec

$$\tilde{U} = \frac{\overline{\rho U}}{\bar{\rho}} \quad (3.4)$$

Ici, le tilde montre la moyenne de Favre qui est utilisée pour simplifier l'écriture des équations dans les cas des écoulements à densité variable. Le double prime montre la fluctuation de Favre de l'entité. L'application de cette moyenne aux équations de Navier-Stokes réactives donne:

- **Equation de continuité**

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{u}_i) = 0 \quad (3.5)$$

- **Equation de conservation des espèces**

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Y}_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{Y}_k) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\overline{V_{k,i} Y_k} + \bar{\rho} \tilde{u}_i'' \tilde{Y}_k'') = \tilde{\omega}_k \quad \text{pour } k = 1, N \quad (3.6)$$

- **Equation de quantité de mouvement :**

$$\frac{\partial \overline{\rho \tilde{u}_i}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\overline{\rho \tilde{u}_i \tilde{u}_j}) + \frac{\partial \overline{p}}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} (\overline{\tau_{ij}} - \overline{\rho \tilde{u}_i \tilde{u}_j''}) \quad (3.7)$$

- **Equation d'enthalpie :**

$$\frac{\partial \overline{\rho \tilde{h}_s}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\overline{\rho \tilde{u}_i \tilde{h}_s}) = \tilde{\omega}_r + \frac{Dp}{Dt} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \overline{\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i}} - \overline{\rho u_i'' h_s''} \right) + \tau_{ij} \frac{\partial u_{ij}}{\partial x_j} - \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \overline{\rho \sum_{k=1}^N V_{k,i} Y_k h_{s,k}} \right) \quad (3.8)$$

Avec

$$\frac{Dp}{Dt} = \frac{\partial \overline{p}}{\partial t} + u_i \frac{\partial \overline{p}}{\partial x_i} = \frac{\partial \overline{p}}{\partial t} + \tilde{u}_i \frac{\partial \overline{p}}{\partial x_i} + u_i'' \frac{\partial \overline{p}}{\partial x_i}$$

- **L'équation d'état du gaz parfait moyennée s'écrit :**

$$\overline{P} = \overline{\rho r T} \quad (3.9)$$

La prise de la moyenne des équations de Navier-stokes génère trois types de termes non fermés. Le premier terme qui apparaît dans l'équation de la quantité de mouvement ( $\overline{\rho \tilde{u}_i \tilde{u}_j''}$ ) est dit tenseur de contraintes de Reynolds. Le deuxième et le troisième terme, sont les termes de transport turbulent d'énergie ( $\overline{\rho \tilde{u}_i \tilde{h}_s''}$ ) et d'espèces ( $\overline{\rho \tilde{u}_i \tilde{Y}''}$ ), ils résultent respectivement des équations d'énergie et des fractions massiques moyennées. Ces deux types de termes sont traités par un modèle de turbulence approprié. Le troisième terme non fermé est le taux moyen de production chimique  $\tilde{\omega}_k$  issu de l'équation des fractions massiques moyennées. La fermeture de ce terme est essentiellement dans le modèle de combustion.

- **Contraintes de Reynolds  $\overline{\rho \tilde{u}_i \tilde{u}_j''}$**

La fermeture de ces termes doit être prise en compte par le modèle de turbulence, cela peut se faire directement par une relation algébrique ; par exemple le modèle de Prandtl de longueur de mélange, ou par les équations des contraintes de Reynolds (par exemple le modèle k-ε ou RSM). La majorité des modèles de turbulence sont développés pour les écoulements non réactifs et ne tiennent pas compte explicitement de l'effet du dégagement de la chaleur sur les contraintes de Reynolds.

- Flux turbulents d'espèces  $\overline{\rho \tilde{u}_i \tilde{Y}''}$  et d'enthalpie  $\overline{\rho \tilde{u}'' \tilde{h}_s''}$

Généralement, ces flux sont modélisés par une fermeture classique en gradient

$$\overline{\rho \tilde{u}_i \tilde{Y}''} = - \frac{\mu_t}{S_{c_{k_i}}} \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial x_i} \quad (3.10)$$

Où  $\mu_t$  est la viscosité turbulente calculée à partir du modèle de turbulence et  $S_{ct}$  est le nombre de Schmidt turbulent pour l'espèce k.

- Equation du transfert radiatif

Le rayonnement thermique est un phénomène d'origine électromagnétique émis par les molécules du milieu lorsqu'elles sont le lieu de transitions de niveaux électroniques. Dans la plupart des applications en combustion, les transferts thermiques par rayonnement s'effectuent à des longueurs d'ondes appartenant au domaine du visible et de l'infrarouge [4].

Il intervient comme un terme source dans l'équation de conservation de l'énergie, son influence est incontournable dans les domaines industriels et surtout lorsqu'il s'agit de la prédiction des émissions polluantes de type NO.

Les transferts radiatifs sont gouvernés par l'Equation de transfert Radiatif (notée ETR) qui s'exprime [5] par:

$$\frac{dI(\vec{r}, \vec{s})}{dS} = -(a + \sigma_s)I(\vec{r}, \vec{s}) + a \left( \frac{\sigma T^4}{\pi} \right) + \frac{\sigma_s}{\pi} \int_0^{4\pi} (\vec{r}, \vec{s}') \Phi(\vec{s}, \vec{s}') d\Omega' \quad (3.11)$$

Cette équation montre que la variation de l'intensité radiative I, en un point (représenté par son vecteur position  $\vec{r}$ ) et dans la direction  $\vec{s}$  est liée à :

- La perte de l'intensité radiative dans la direction  $\vec{s}$ , due à l'absorption et la diffusion de I par le milieu participant, premier terme du membre de droite de l'équation (3.11), l'absorption a et  $\sigma_s$  la diffusion sont représentées respectivement par le coefficient d'absorption et de diffusion de ce milieu. Dans le cas d'un milieu gazeux exempt de particules solides, ce

qui est le cas des produits de la combustion du gaz naturel pour autant que celle-ci se produise sans production de suie, le coefficient de diffusion peut être omis dans l'équation (3.11).

- L'accroissement de  $I$  due à l'émission propre du milieu gazeux, exprimée par le second terme du membre de droite (où  $\sigma$  est la constante de Stefan-Boltzmann) et à la diffusion, dans la direction  $\vec{s}$  des intensités provenant de toutes les directions  $\vec{s}'$  environnantes, représenté par le dernier terme de l'équation (3.11). La fonction de phase  $\Phi(\vec{s}, \vec{s}')$  caractérise la manière dont le milieu redirige les directions vers les directions par diffusion, à nouveau, dans le cas d'un milieu purement gazeux, ce dernier terme peut être omis de l'ETR.

### 3-2 - Modèle de turbulence k- $\varepsilon$

L'objectif de ce modèle est de donner une fermeture, à une échelle intégrale  $l$ , pour le tenseur de Reynolds et pour les termes de transport turbulent dans les équations de Navier-stokes moyennées. Ce modèle utilise le principe de la viscosité turbulente  $\mu_t$  qui est propriété du champ de l'écoulement turbulent et pas du mélange gazeux. Par l'analyse dimensionnelle,  $\mu_t$  est reliée à l'échelle intégrale  $l$  et à la fluctuation de la vitesse  $u'$  par [6] :

$$\mu_t = \frac{C_\mu \bar{\rho} \tilde{k}^2}{\tilde{\varepsilon}} \quad \text{Avec } C_\mu = 0.09 \quad (3.13)$$

où  $\tilde{\varepsilon}$  est le taux de dissipation turbulent de  $\tilde{k}$ .

Si on admet une isotropie locale de la turbulence on a;

- l'équation de transport de  $\tilde{k}$  est obtenue par sommation de la trace du tenseur de contrainte de Reynolds :

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{k}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{k}) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial \tilde{k}}{\partial x_i} \right] - P_k - \bar{\rho} \tilde{\varepsilon} \quad (3.13)$$

- L'équation de transport de  $\tilde{\varepsilon}$  peut être modélisée analogiquement à celle de  $\tilde{k}$  donnant ainsi:

$$\frac{\partial \tilde{\rho} \tilde{\varepsilon}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\tilde{\rho} \tilde{u}_i \tilde{\varepsilon}) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \tilde{\varepsilon}}{\partial x_i} \right] - C_{\varepsilon 1} \frac{\tilde{\varepsilon}}{\tilde{k}} P_k - C_{\varepsilon 2} \frac{\tilde{\varepsilon}}{\tilde{k}} \tilde{\rho} \tilde{\varepsilon} \quad (3.14)$$

Avec le taux de production de l'énergie de turbulence donné par :

$$P_k = \mu_t \left( \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} - \frac{2}{3} \left( \tilde{\rho} \tilde{k} + \mu_t \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_i} \right) \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} \quad (3.15)$$

Les cinq constantes du modèle standard ( $k - \varepsilon$ ) sont données dans le tableau (3.1). Ces valeurs sont déterminées expérimentalement par cisailées [1].

$C_\mu$	$C_{\varepsilon 1}$	$C_{\varepsilon 2}$	$\sigma_k$	$\sigma_\varepsilon$
0.09	1.44	1.92	1.0	1.3

Table 3.1 Constantes du modèle ( $k - \varepsilon$ ) standard

Pour une discussion détaillée de la dérivation de ces équations; il est nécessaire de se renvoyer à la réf.[7]. Avec l'ensemble de ces constantes, le modèle (k-ε) peut calculer avec précision plusieurs types d'écoulement libres et confinés. Cependant, il est bien connu qu'il surestime l'épanouissement dans les écoulements des jets axisymétriques. Plusieurs tentatives de corrections ont porté sur la modification des constantes du modèle. Particulièrement, dans le but de diminuer l'angle du cône potentiel, la constante  $C_{\varepsilon 1}$  est augmentée à une valeur de 1.52 [8] ou 1.6 [9]. Une autre tentative consiste en l'augmentation du terme source du taux de dissipation de l'énergie cinétique  $\tilde{\varepsilon}$ , Lindstedt et al. [10] ont diminué la valeur de la constante  $C_{\varepsilon 2}$  de 1.92 à 1.8.

### 3-3 - Correction de Pope :

S. Pope a proposé une explication physique du problème du modèle (k-ε) [11] et selon laquelle il remarque que dans les écoulements axisymétriques, les tourbillons toriques (Figure 3.3) qui entourent le jet vont être étirés, ce qui provoque un taux de dissipation  $\tilde{\varepsilon}$  plus important

comparativement au cas plan. Mathématiquement, cette correction introduit un nouveau terme source dans l'équation de  $\tilde{\varepsilon}$  qui s'écrit :

$$\frac{\partial \overline{\rho \tilde{\varepsilon}}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\overline{\rho \tilde{u}_i \tilde{\varepsilon}}) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \tilde{\varepsilon}}{\partial x_i} \right] - C_{\varepsilon 1} \frac{\tilde{\varepsilon}}{\tilde{k}} P_k + (C_{\varepsilon 3} \tilde{\kappa} - C_{\varepsilon 2}) \overline{\rho} \frac{\tilde{\varepsilon}^2}{\tilde{k}} \quad (3.16)$$

Avec :

$$\tilde{\kappa} = \tilde{\omega}_{ij} \tilde{\omega}_{jk} \tilde{S}_{kj} \quad (3.17)$$

$$\tilde{\omega}_{ij} = \frac{1}{2} \frac{\tilde{k}}{\tilde{\varepsilon}} \left( \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} - \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) \quad (3.18)$$

$$\tilde{S}_{ij} = \frac{1}{2} \frac{\tilde{k}}{\tilde{\varepsilon}} \left( \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) \quad (3.19)$$

Dans le cas d'un écoulement axisymétrique sans pré rotation, l'invariant  $\tilde{\kappa}$  se réduit à :

$$\tilde{\kappa} = \frac{1}{4} \left( \frac{\tilde{k}}{\tilde{\varepsilon}} \right)^3 \left( \frac{\partial \tilde{u}}{\partial r} - \frac{\partial \tilde{v}}{\partial x} \right)^2 \frac{\tilde{v}^2}{r} \quad (3.20)$$

L'étirement des tourbillons n'intervient pas dans les écoulements plans, limitant ainsi la correction aux cas axisymétriques seulement. Pour avoir une bonne concordance entre la similitude et l'expérience des jets ronds turbulents, Pope donne une valeur de  $c_{\varepsilon 3} = 0.79$  issue de l'expérience dans le cas des jets ronds libres incompressibles.

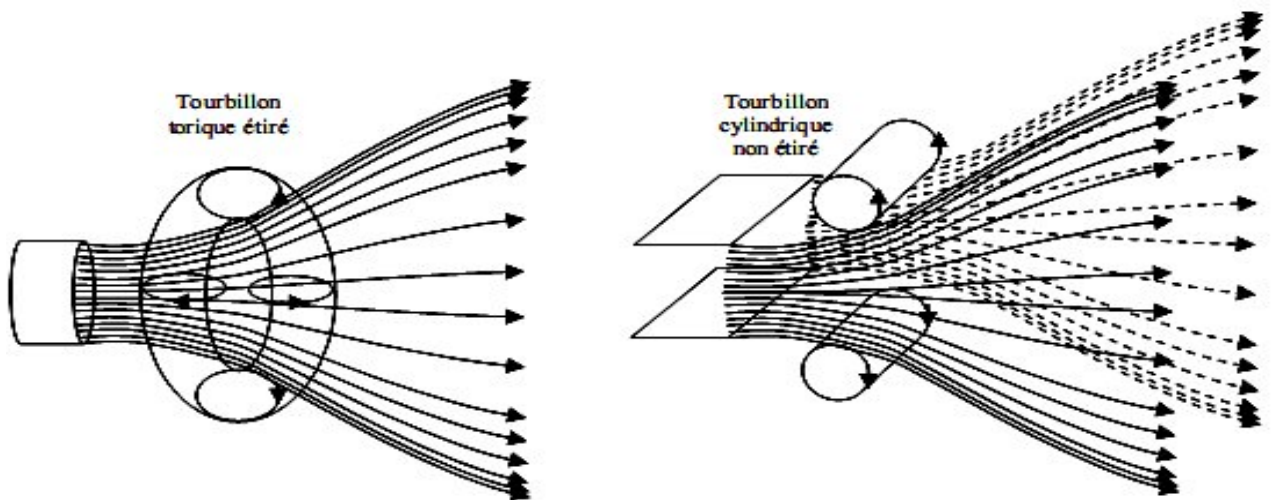


Figure 3.3 : (a) Jet rond axisymétrique

(b) Jet avec plan de symétrie

## Bibliographie

1. Chassaing, P. (2000). **Turbulence en mécanique des fluides**. Cépaduès édition.
2. Wilcox, D. C. (1994). **Turbulence Modeling for CFD**. DCW industries Inc.
3. Poinso, T. et Veynante, D. (2005). **Theoretical and numerical combustion**. R.T. Edwards.
4. Joseph, D., 2004 **Modélisation des transferts radiatifs en combustion par méthode aux ordonnées discrètes sur des maillages non structurés tridimensionnels**, thèse de Doctorat Toulouse, France.
5. Fluent Inc, (2006). **Fluent 6.3 User's Guide**. Chapter 13, Modeling Heat Transfer Lebanon, New Hampshire, USA.
6. Blazek, J. (2001). **Computational fluid dynamics: principles and applications**. Elsevier
7. Bilger R.W., (1988). **The structure of turbulent non-premixed flames**. Proceeding Combustion Institut, 22, 475 - 488.
8. Janika, J. et Peters, N. (1982). **Prediction of turbulent jet diffusion flame lift-off using a PDF transport equation**. Combustion Institute ed. 9<sup>th</sup> int. symposium on combustion, Pittsburgh 367-374,
9. Lindstedt, R. P.; Louloudi, S.A. et Vaos, E. M. (2000). **Joint scalar pdf modeling of pollutant formation in piloted turbulent jet diffusion flames with comprehensive chemistry**. Proceedings of the Combustion Institute, (28), 149-156.
10. Ferreira, J. C. (1996). **Flamelet modeling of stabilization in turbulent non premixed combustion**. Ph. D Dissertation, ETHZ, Switzerland.
11. Pope, S.B. (1978). **An explanation of the turbulent Round-Jet/Plane-Jet anomaly**. Journal The American Institute of Aeronautics and Astronautics, 16(3):279–281

## 4. Modélisation de la combustion turbulente

### 4.1. Introduction

L'un des objectifs des modèles de combustion turbulente est de déterminer le taux de production moyen  $\omega$  engendré par les réactions chimiques. Du fait de la forte non-linéarité des taux de production (ou de destruction) des différentes espèces, l'estimation du taux de production chimique moyen n'est pas directe et doit être basée sur une approche phénoménologique. L'analyse décrite au cours du chapitre précédent a conduit à une classification des régimes de combustion et a permis de développer des modèles adaptés à chaque régime de combustion. Ces différents modèles ont chacun une approche physique du problème de combustion turbulente qui lui est propre.

Nous allons introduire la fraction de mélange,  $Z$ , qui est nulle ( $Z=0$ ) dans l'oxydant pur et égale à l'unité ( $Z=1$ ) dans le combustible pur alors que pour le mélange elle est comprise entre zéro et l'unité :  $0 < Z < 1$

Les trois principales approches utilisées pour décrire les flammes turbulentes sont présentées sur la Figure (4.1) [1].

L'approche basée sur une analyse géométrique de la flamme décrit cette dernière comme une surface.

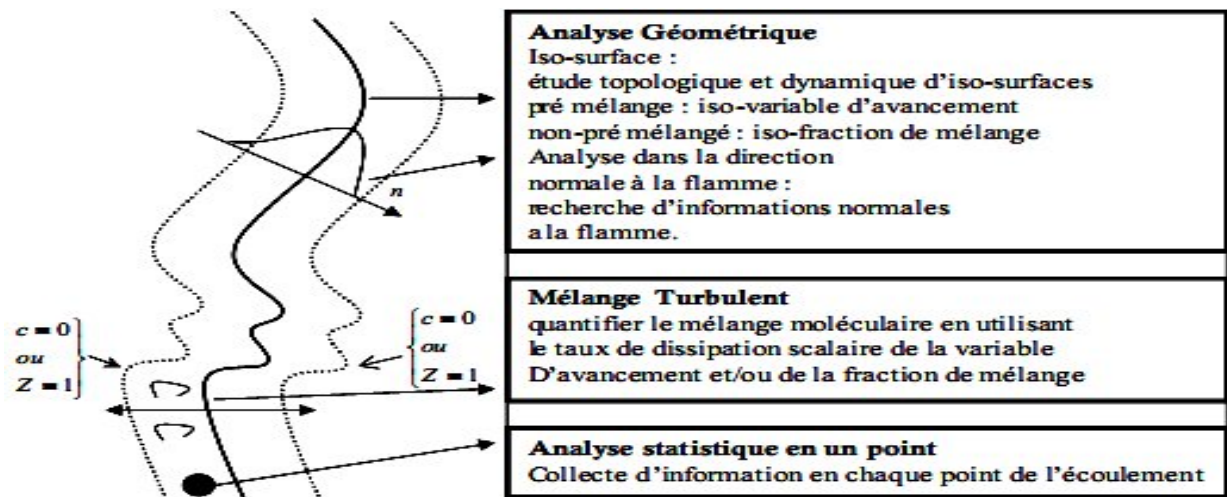


Figure 4.1 – Trois types d'analyses des flammes turbulentes prémélangées ou non-prémélangées [1]

Cette analyse est généralement utilisée avec une hypothèse de flammelette (flamme plissée), ce qui permet à partir des propriétés physiques et dynamiques d'une iso-surface ( $Z$ ) de déterminer le champ scalaire correspondant. La flamme est alors considérée comme une interface séparant les gaz frais des gaz brûlés (ou le combustible de l'oxydant). Il existe essentiellement deux méthodes de calcul, basées sur cette approche. La première consiste à dériver une équation de transport d'une iso-surface. La seconde utilise le concept de densité de surface de flamme initialement proposé par Marble et Broadwell en 1978 [2]. La densité de surface de flamme, notée  $\Sigma$ , mesure la surface de la flamme disponible localement par unité de volume. Cette quantité est directement reliée au taux de réaction chimique moyen :

$$\bar{\omega}_i = \Theta_i \Sigma \quad (4.1)$$

$\Theta_i$  est le taux de production chimique local moyenné le long de la direction normale à la flamme. Si on considère que les flammes sont juste plissées alors  $\Theta_i$  peut être estimé à partir du calcul d'une flamme laminaire. L'avantage de ce type d'approche est de découpler la description chimique de la flamme (modèle local pour  $\Theta_i$ ) de l'interaction de la flamme avec la turbulence ( $\Sigma$ ).

Le taux de réaction chimique moyen peut également être estimé en cherchant à quantifier précisément le mélange que la turbulence engendre entre les gaz frais et les gaz brûlés ou entre le

combustible et l'oxydant. Les termes qui représentent ce mélange sont les termes de dissipation scalaire, qui apparaissent dans l'équation de la variance de  $Z$ .

Dans le cas de flammes non pré-mélangées, comme le combustible et l'oxydant doivent se mélanger pour réagir, le taux de dissipation scalaire joue également un rôle essentiel. La réaction chimique n'agit pas directement sur ce taux de dissipation scalaire mais indirectement par le biais des variations de masse volumique. Les taux de dissipation scalaire sont des paramètres clés pour la modélisation de la combustion turbulente. Quelle que soit l'approche physique utilisée, les taux de dissipation scalaire interviennent directement ou indirectement dans les modèles. Certaines méthodes proposent d'ailleurs de résoudre directement des équations de transport pour ces quantités [3,4].

Les propriétés statistiques des champs scalaires, en un point de l'écoulement (moyennes, variances), peuvent être déduites de la fonction densité de probabilité (PDF). Contrairement à l'analyse géométrique qui considère souvent la flamme comme une interface. L'utilisation d'une méthode de PDF permet d'obtenir les propriétés statistiques d'états intermédiaires c'est-à-dire dans le front de flamme.

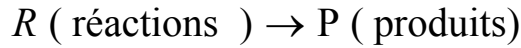
Il s'agit maintenant de trouver des modèles pour exprimer les taux de réaction moyens en fonction des variables connues, c'est-à-dire des valeurs moyennes elles-mêmes, et probablement aussi en fonction des caractéristiques de la turbulence, puisque celle-ci doit jouer un rôle.

Parmi les modèles les plus simples et les plus utilisés sont: le modèle de dissipation de tourbillons (Eddy dissipation Model : EDM) et le modèle de la fonction de densité de probabilité (probability density function PDF).

## 4.2. Modèle Eddy Break Up

Ce modèle est basé sur une analyse phénoménologique de la combustion turbulente aux grands nombres de Reynolds ( $Re \gg 1$ ) et de Damköhler ( $Da \gg 1$ ).

Suivant la cascade de Kolmogorov, la turbulence provoque la cassure des tourbillons des gaz frais. Une des premières approches modélisant le terme source chimique moyen est proposé par Spalding [5]. Il suppose que le mélange turbulent contrôle le taux de réaction chimique. En prenant une réaction chimique irréversible à une seule étape, on a :



Le taux de réaction moyen les produits est donné par :

$$\tilde{\omega}_p = C_{EBU} \bar{\rho} \frac{\tilde{\varepsilon}}{\tilde{k}} (\tilde{Y}_p'^2)^{1/2} \quad (4.2)$$

Avec  $\tilde{Y}_p'^2$  est la variance de la fraction massique des produits et  $C_{EBU}$  est une constante libre de modélisation. Plus tard, ce modèle est amélioré par Magnussen et Hjertager [6], donnant ainsi le modèle de dissipation des tourbillons (Eddy Dissipation Model : EDM). Dans ce modèle, la variance  $\tilde{Y}_p'^2$  est substituée par la fraction massique de l'espèce en déficit, symbole de cette fraction massique. D'où, le terme source moyen est calculé par :

$$\tilde{\omega} = A \bar{\rho} \frac{\tilde{\varepsilon}}{\tilde{k}} \min \left( \tilde{Y}_F, \frac{\tilde{Y}_P}{\nu}, B \frac{\tilde{Y}_O}{1+\nu} \right) \quad (4.3)$$

Où  $A$  et  $B$  sont des constantes du modèle et le coefficient stœchiométrique est donné par :

$$\nu = \frac{\nu_o M_o}{\nu_F M_F} \quad (4.4)$$

$\nu_o$  est le coefficient stœchiométrique de l'oxygène et  $\nu_F$  est celui du fuel.

En plus, les termes de transport turbulent, pour les scalaires réactifs, sont modélisés par l'approximation en gradient. Dans les deux modèles, l'échelle de temps chimique est remplacée par celle du temps turbulent. Il faut noter que les constantes des deux modèles sont libres. Elles sont déterminées par optimisation pour chaque combustible et pour chaque géométrie. Ces modèles sont largement utilisés dans les codes, surtout pour démarrer d'autres modèles plus compliqués, à cause de leurs implémentations très simples et leurs coûts en calcul sont négligeable.

### 4.3. Modèle EDM

Le modèle EDM est intégré dans le code fluent, le taux de production d'une réaction élémentaire  $k$ , est déterminé par le minimum des deux expressions suivantes :

#### Limiteur des réactifs

$$R_{i,r} = v'_{i,r} M_{\omega,i} A \rho \frac{\varepsilon}{k} \min_R \left( \frac{Y_R}{v'_{R,r} M_{\omega,R}} \right) \quad (4.5)$$

#### Limiteur des produits

$$R_{i,r} = v'_{i,r} M_{\omega,i} A B \rho \frac{\varepsilon}{k} \frac{\sum_P Y_P}{\sum_j^N v''_{r,j} M_{\omega,j}} \quad (4.6)$$

Avec  $Y_P$  est la fraction massique des produits et  $Y_R$  est la fraction massique du réactif R, A et B sont des constantes qui prennent pour valeurs 4 et 0.5.

### 4.4. Modèle de la fonction de densité de probabilité (en anglais: PDF).

La base de l'approche employée pour résoudre une flamme de diffusion consiste à lier les propriétés thermo-chimiques instantanées du fluide (température, masse volumique et fraction massique) à une grandeur scalaire conservative appelée fraction de mélange. Cette dernière représente la fraction de masse du combustible dans le mélange air-combustible et peut être écrite en fonction de la fraction de masse atomique:

#### 4.4.1 La Fraction de mélange

La fraction de mélange est définie par l'Équation [7] :

$$Z_f = \frac{\beta - \beta^2}{\beta^1 - \beta^2} = \frac{\left[ Y_F - \left( \frac{\nu_F W_F}{\nu_O W_O} \right)_{st} Y_O \right]_2 - \left[ Y_F - \left( \frac{\nu_F W_F}{\nu_O W_O} \right)_{st} Y_O \right]_1}{\left[ Y_F - \left( \frac{\nu_F W_F}{\nu_O W_O} \right)_{st} Y_O \right]_1 - \left[ Y_F - \left( \frac{\nu_F W_F}{\nu_O W_O} \right)_{st} Y_O \right]_2} \quad (4.7)$$

Où  $\beta$  est la fonction Shvab-Zeldovich représentant un invariant scalaire de l'écoulement. Les masses molaires du fuel et de l'oxydant sont définies par  $W_F$  et  $W_O$ . pour le combustible (indiqué par l'indice 1) la valeur de la fraction de mélange vaut 1, alors qu'elle est de 0 pour l'oxydant (repéré par un indice 2). Si l'on utilise l'hypothèse de chimie infiniment rapide et irréversible développée par Burke et Schuman [8], la zone de réaction devient infiniment mince et il n'est pas possible de trouver simultanément de l'oxydant et du combustible. La fraction de mélange stoechiométrique est alors donnée par:

$$Z_f = Z_{fs} = \frac{- \left[ Y_F - \left( \frac{\nu_F W_F}{\nu_O W_O} \right)_{st} Y_O \right]_2}{\left[ Y_F - \left( \frac{\nu_F W_F}{\nu_O W_O} \right)_{st} Y_O \right]_1 - \left[ Y_F - \left( \frac{\nu_F W_F}{\nu_O W_O} \right)_{st} Y_O \right]_2} \quad (4.8)$$

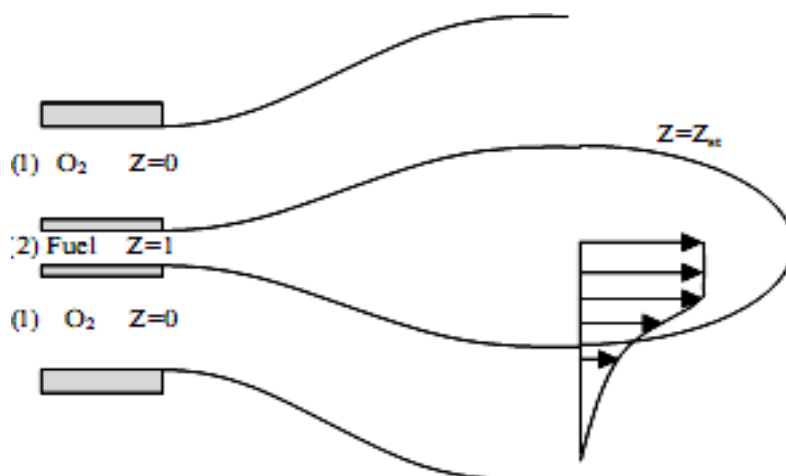


Figure 4.2 Exemple de l'injection séparée non pré-mélangée

#### 4.4.2 Equation de transport de Fraction de mélange

A diffusivités et capacités calorifiques égales, l'équation de transport pour la fraction de mélange s'écrit, avec la moyenne de Favre.

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Z}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{Z}) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \bar{\rho} D \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_i} - \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{Z}'' \right) \quad (4.8)$$

#### 4.4.3 Equation de transport de la variance

Dans un environnement turbulent, la fraction de mélange peut se fluctuer de façon chaotique. Pour modéliser ces fluctuations on calcule sa variance. Si la moyenne de la fraction de mélange est donnée par l'équation précédente, la variance  $\tilde{Z}''^2$  peut s'écrire

$$\tilde{Z}''^2 = \overline{(Z - \tilde{Z})^2} = \frac{1}{\tau} \int_0^\tau [Z(t) - \tilde{Z}]^2 dt \quad (4.9)$$

L'équation de transport pour la variance de la fraction de mélange moyennée avec la décomposition de Favre est donnée par [9] :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Z}''^2}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{Z}''^2) = & \underbrace{- \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} u_i'' \tilde{Z}''^2)}_{\text{transport turbulent}} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_i} \left( \bar{\rho} D \frac{\partial \tilde{Z}''^2}{\partial x_i} \right)}_{\text{diffusion moléculaire}} + 2 \tilde{Z}'' \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \bar{\rho} D \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_i} \right) \\ & - \underbrace{2 \bar{\rho} u_i'' \tilde{Z}'' \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_i}}_{\text{production}} - \underbrace{2 \bar{\rho} D \frac{\partial \tilde{Z}''}{\partial x_i} \frac{\partial \tilde{Z}''}{\partial x_i}}_{\text{dissipation}} \end{aligned} \quad (4.10)$$

Avec

$$\bar{\rho} \tilde{\chi}_p = 2 \bar{\rho} D \frac{\partial \tilde{Z}''}{\partial x_i} \frac{\partial \tilde{Z}''}{\partial x_i} \quad (4.11)$$

est le taux de dissipation scalaire des fluctuations du champ de fraction de mélange.

On remarque que dans cette équation, figure un terme, qui correspond au transport par des mouvements turbulents, qu'il faut modéliser avec l'hypothèse du gradient, est le suivant [10]:

$$\overline{\rho u_i'' Z''^2} = -\bar{\rho} \frac{\nu_t}{S_{ct}} \frac{\partial \tilde{Z}''^2}{\partial x_i} \quad (4.12)$$

Avec  $\nu_t$  est la viscosité turbulente.

$S_{ct}$  Nombre de Schmidt turbulent, qui est égale à l'unité.

Comme le montre l'équation. (6.14). le taux de dissipation scalaire  $\tilde{\chi}_p$  mesure la décroissance de la fraction de mélange fluctuante estimée par la variance  $\tilde{Z}''^2$ . En fait, ce taux dissipation scalaire  $\tilde{\chi}_p$  joue, pour la fraction de mélange  $Z$ , le même rôle que le taux de dissipation de l'énergie cinétique, avec le champ de vitesse.

Cette analogie est souvent utilisée pour modéliser le temps de mélange turbulent  $\tau_t = k / \varepsilon$

$$\tilde{\chi}_p = C_\chi \frac{\tilde{Z}''^2}{\tau_t} = C_\chi \frac{\varepsilon}{k} \tilde{Z}''^2 \quad (4.13)$$

où  $C_\chi$  est un modèle constant de l'unité de commande. Cette relation exprime simplement que le temps de dissipation scalaire et le temps de dissipation de turbulence sont proportionnels:

$$\frac{\tilde{Z}''^2}{\tilde{\chi}_p} = \frac{1}{C_\chi} \frac{k}{\varepsilon} \quad (4.14)$$

L'équation de fermeture pour  $\tilde{Z}''^2$  utilisée est donc:

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Z}''^2}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i'' \tilde{Z}''^2) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \bar{\rho} \frac{\nu_t}{S_{ct}} \frac{\partial \tilde{Z}''^2}{\partial x_i} \right) + 2\bar{\rho} \frac{\nu_t}{S_{ct}} \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_i} \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_i} - \bar{\rho} C_\chi \frac{\varepsilon}{k} \tilde{Z}''^2 \quad (4.15)$$

Le modèle de combustion est basé sur l'approche Pdf présumée de type  $\beta$  [11], qui est basée sur l'hypothèse classique de chimie rapide associée à une réaction où la fonction de densité de probabilité  $P(Z)$  est représentée en fonction de la fraction du mélange  $Z$  par l'expression suivante :

$$P(Z) = \frac{Z^{\alpha-1} (1-Z)^{\beta-1}}{\int_0^1 Z^{\alpha-1} (1-Z)^{\beta-1} dZ} \quad (4.16)$$

$$\text{avec} \quad \alpha = \tilde{Z} \left[ \frac{\tilde{Z}(1-\tilde{Z})}{\tilde{Z}''^2} - 1 \right] \quad \text{et} \quad \beta = (1-\tilde{Z}) \left[ \frac{\tilde{Z}(1-\tilde{Z})}{\tilde{Z}''^2} - 1 \right] \quad (4.17)$$

La complexité ajoutée par la turbulence, provient de la moyenne des grandeurs. Pour déterminer les valeurs moyennes, la valeur moyenne de  $Z$  ne suffit pas, mais si le fichier Pdf,  $P(Z)$  est connu, la moyenne de la fraction massique des espèces ( $\tilde{Y}_k$ ), la température moyenne ( $\tilde{T}$ ) ou le taux de réaction moyen ( $\bar{\omega}_k$ ) sont donnés par [12]

#### 4.5 Modèles des flammelettes

Pour des nombres de Damköhler élevés (chimie rapide devant les temps de mélange) ou pour des énergies d'activation suffisamment importantes, les réactions chimiques et les transferts thermiques ont lieu dans des couches minces. Si la taille caractéristique de cette couche est inférieure aux échelles de la turbulence environnante, les structures turbulentes ne peuvent pas pénétrer la zone de réaction et détruire la structure locale de la flamme (*séparation d'échelles entre l'échelle chimique et turbulente*). L'effet de la turbulence est alors limité à la déformation et à l'étirement de la flamme; on parle alors de régime de flammelettes. La position de la flamme instantanée dans le champ de l'écoulement turbulent peut alors être déterminée par les iso-surfaces des scalaires non réactifs. En cette position du front de flamme, la solution des équations de la flammelette, i.e. la structure de la flamme, est alors rattachée au champ de l'écoulement turbulent.

### 4.5.1 Concept des flammelettes laminaires

Le concept des flammelettes [13] pour la combustion non-prémélangée décrit l'interaction de la chimie avec la turbulence à la limite des réactions rapides (Grands nombres de Damkhöler). La combustion se fait dans des couches minces avec une structure interne dite flammelettes. La flamme turbulente est traitée comme un ensemble de flammelettes laminaires qui sont incorporées dans le champ de l'écoulement turbulent.

L'avantage principal de ce modèle est l'information détaillée du procédé de transport moléculaire et la cinétique élémentaire qui sont incluses. La résolution numérique des petites échelles de temps et de longueurs n'est pas nécessaire, ceci évite les problèmes de la cinétique fortement non linéaire dans le champ d'écoulement fluctuant, ce qui rend la méthode très robuste.

Seulement deux équations scalaires doivent être résolues indépendamment du nombre d'espèces chimiques requises dans la simulation. Les informations du modèle des flammes laminaires sont pré calculés et stockés dans des bibliothèques pour réduire le temps de calcul. D'autre part, le modèle reste toujours limité par les suppositions de la limite rapide de la chimie et néglige les différences des nombres de Lewis pour les espèces chimiques. Le couplage de la chimie laminaire avec le champ d'écoulement fluctuant est fait par une méthode statistique. Pour obtenir le modèle des flammelettes, il est nécessaire de faire les suppositions suivantes

- Chimie rapide, nombre de Lewis unitaires pour toutes les espèces  $Le_i = 1$ .
- La combustion se fait dans le régime des flammelettes.

### 4.5.2 Equations de la flammelette laminaire

La structure d'une flamme dans un régime de flammelettes peut être décrite localement par les équations de flammelettes. Les équations monodimensionnelles de flammelettes laminaires de diffusion peuvent s'établir à partir des équations de conservation des espèces et de l'énergie (ou de la température) en introduisant un nouveau système de coordonnées localement associé à une iso-surface de mélange stœchiométrique. En choisissant la fraction de mélange  $Z$  comme première dimension (perpendiculaire à la surface stœchiométrique) et deux directions alignées à la surface (figure....), un changement de variable peut être opéré sur les équations de conservation d'espèces et d'énergie.

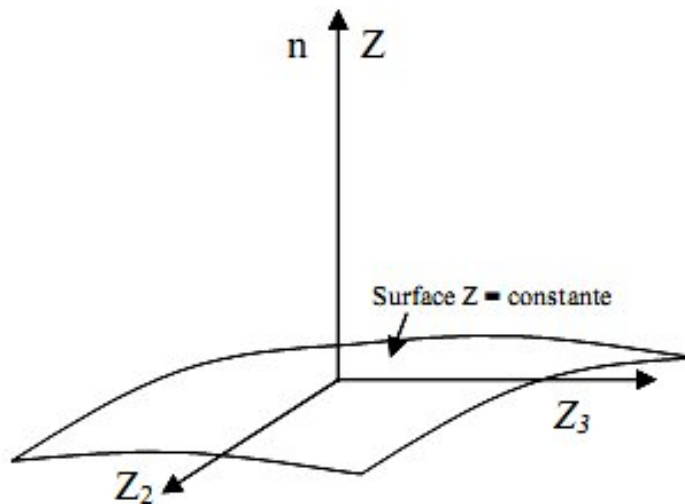


Figure 4.3. Iso-surface  $Z$  et son système de coordonnées orthogonal

Dans une flamme laminaire à contre-courant, les changements normaux à la surface stœchiométrique sont de première importance comparés aux changements dans les autres directions. En supposant des nombres de Lewis d'espèces  $k$  constants,  $Le_k$ , les équations de flammelettes transitoires pour les fractions massiques d'espèces et pour la température s'écrivent alors [14] :

$$\rho \frac{\partial T}{\partial t} + \rho u_i \frac{\partial T}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \rho D \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) = \sum_{k=1}^N \frac{h_k}{C_p} \omega_k \quad (4.18)$$

Le changement de système de coordonnées est donné par :

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial \tau} + \frac{\partial Z}{\partial t} \frac{\partial}{\partial Z} \\ \frac{\partial}{\partial x_k} &= \frac{\partial}{\partial Z_k} + \frac{\partial Z}{\partial x_k} \frac{\partial}{\partial Z} \quad k = 2,3 \\ \frac{\partial}{\partial x_1} &= \frac{\partial Z}{\partial x_1} \frac{\partial}{\partial Z}\end{aligned}\quad (4.19)$$

Le nombre de Lewis est supposé constant :

$$Le_k = \frac{\lambda_k}{\rho_k C_{pk}} \quad (4.20)$$

On obtient :

$$\begin{aligned}& \rho \left( \frac{\partial T}{\partial \tau} + u_2 \frac{\partial T}{\partial Z_2} + u_3 \frac{\partial T}{\partial Z_3} \right) - \frac{\partial(\rho D)}{\partial x_2} \frac{\partial T}{\partial Z_2} - \frac{\partial(\rho D)}{\partial x_3} \frac{\partial T}{\partial Z_3} \\ & - \rho D \left[ \left( \frac{\partial Z}{\partial x_\alpha} \right)^2 \frac{\partial^2 T}{\partial Z^2} + 2 \frac{\partial Z}{\partial x_2} \frac{\partial^2 T}{\partial Z \partial Z_2} + 2 \frac{\partial Z}{\partial x_3} \frac{\partial^2 T}{\partial Z \partial Z_3} + \frac{\partial^2 T}{\partial Z_2^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial Z_3^2} \right] \\ & = \frac{1}{\rho C_p} \sum_{k=1}^N h_k \dot{\omega}_k\end{aligned}\quad (4.21)$$

Puisque la flammelette est mince, seulement les gradients normaux à la surface de mélange sont importants, les autres termes peuvent être négligés. L'équation ainsi obtenue est unidimensionnelle:

$$\rho \frac{\partial T}{\partial t} - \frac{\rho \chi}{2} \frac{\partial^2 T}{\partial Z^2} = \frac{1}{\rho C_p} \sum_{k=1}^N h_k \dot{\omega}_k \quad (4.22)$$

La même procédure est appliquée aux équations des espèces chimiques qui s'écrivent dans le nouveau système de coordonnées :

$$\rho \frac{\partial Y_k}{\partial t} - \frac{\rho \chi}{2Le_k} \frac{\partial^2 Y_k}{\partial Z^2} = \dot{\omega}_k \quad (4.23)$$

avec les conditions aux limites suivantes :

$$Y_k(Z=0) = Y_k^{oxydant} \quad T(Z=0) = T^{oxydant} \quad (4.24)$$

$$Y_k(Z=1) = Y_k^{fuel} \quad T(Z=1) = T^{fuel} \quad (4.25)$$

où  $\rho$ ,  $\dot{\omega}_k$ ,  $h_k$  et  $c_{p,k}$  sont respectivement la densité, le terme source, et la capacité calorifique massique de l'espèce k.

On a introduit ici le taux de dissipation scalaire  $\chi_Z = 2D_Z \left( \frac{\partial Z}{\partial x_i} \frac{\partial Z}{\partial x_i} \right)$ , où  $D_Z = \frac{\lambda}{\rho c_p}$  est la diffusivité moléculaire. Une expression analytique du paramètre  $\chi_Z$  peut être obtenue comme solution d'un problème monodimensionnel de mélange. Dans ce cas là, Peters a, en effet, montré [13] que le taux de dissipation scalaire représente l'inverse du temps de résidence. Le taux de dissipation scalaire est augmenté par les effets de l'étirement du champ d'écoulement et réduit par la diffusion, la flamme s'éteint à une valeur critique de  $\chi = \chi_q$ . L'étirement dans l'espace physique réduit l'épaisseur de la zone de réaction, les pertes de chaleur par conduction dépassent la production par réaction et la température chute à des valeurs des gaz frais et l'extinction de la flamme qui se produit peut s'écrire :

$$\chi_Z = \chi_{Z_{st}} \exp(2[erfc^{-1}(2Z_{st})]^2 - [erfc^{-1}(2Z_{st})]^2) \quad (4.26)$$

Ce paramètre, qui dépend intrinsèquement des conditions de l'écoulement, peut aussi être modélisé comme une fonction de la fraction de mélange z et de l'étirement a via [14].

$$\chi_Z = \frac{a}{\pi} \exp(-2[erfc^{-1}(2Z-1)]^2) = aF(Z) \quad (4.27)$$

En introduisant le taux de dissipation scalaire à la stœchiométrie  $\chi_{Z_{st}} = \chi(Z = Z_{st})$ .

on a :

$$\chi = \chi_{Z_{st}} \frac{F(Z)}{F(Z_{st})} \quad (4.28)$$

La conclusion la plus importante c'est que la structure de la flammelette en présence de la chimie rapide peut être décrite par un modèle de flamme unidimensionnel. Cela va être utilisé pour modéliser les écoulements turbulents réactifs. Si on a un mécanisme réactionnel chimique donné, des conditions aux limites appropriées et un profil du taux de dissipation scalaire fixé, les équations de la flammelette peuvent être résolues et les distributions des fractions massiques et de la température peuvent être déterminées :

$$\begin{aligned} Y_k &= Y_k(Z, \chi) \\ T &= T(Z, \chi) \end{aligned} \quad (4.29)$$

Les champs obtenus sont laminaires, il est nécessaire d'utiliser une approche statistique pour déterminer les champs turbulents.

### 4.5.3 Couplage de la flammelette laminaire et du champ d'écoulement turbulent

Pour obtenir le champ turbulent, on utilise une PDF présumée du type bêta (voir section 4). On résout l'équation de la fraction de mélange  $Z$  pondérée par la masse volumique (Favre) :

$$\frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{Z})}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_Z} \right) \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_i} \right] \quad (4.30)$$

L'information statistique sur la fraction de mélange est obtenue à partir de la variance de  $Z$  de l'équation :

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial x_i} \left( \overline{\rho} \tilde{u}_i \tilde{Z}''^2 \right) &= - \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \overline{\rho} u_i'' Z''^2 \right) + \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \overline{\rho D \frac{\partial Z''^2}{\partial x_i}} \right) \\
+ 2 \overline{Z''} \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \overline{\rho D \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_i}} \right) &- 2 \overline{\rho u_i'' Z''} \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_i} - \overline{\rho} \tilde{\chi}
\end{aligned} \tag{4.31}$$

La structure de cette équation est similaire à celle de l'équation de  $\tilde{Z}$  excepté pour les deux derniers termes à droites qui modélisent la production et la dissipation de la variance.

Dans ce travail, le taux de dissipation scalaire est modélisé dans l'écoulement turbulent par la relation suivante [14] :

$$\tilde{\chi} = C_\chi \frac{\tilde{\varepsilon}}{\tilde{k}} \tilde{Z}''^2 \tag{4.32}$$

Qui introduit l'effet de l'éirement et des fluctuations de la fraction de mélange. Les coefficients sont donnés par la table 1:

$\sigma_Z$	$\sigma_Z''^2$	$C_\chi$
0.9	0.9	2.0

Table 4.1

La composition moyenne du fluide est calculée en fonction de la fraction du mélange moyenne, de sa variance et du taux de dissipation scalaire en utilisant une table calculée au préalable pour la flammelette laminaire.

$$\tilde{Y}_i = \tilde{Y}_i(\tilde{Z}, \tilde{Z}''^2, \tilde{\chi}_{st}) = \int_0^1 Y_i(Z, \tilde{\chi}_{st}) P_{\tilde{Z}, \tilde{Z}''^2}(Z) dZ \tag{4.33}$$

L'intégration n'est pas faite durant le calcul CFD, elle fait partie de la génération de la bibliothèque des flammelettes. Le solveur CFD utilise directement les valeurs de cette bibliothèque (Figure 4.4).

#### 4.5.4 Génération des bibliothèques des flammelettes

Ansys-FLUENT utilise la (PréPDF) comme outil numérique pour générer les tables (bibliothèques) des flammelettes qui sont exploitées par le solveur dans le code CFD. A partir d'un mécanisme réactionnel élémentaire détaillé, ce programme effectue la résolution des équations des flammelettes laminaires qui sont celles des fractions massiques de toutes les espèces et celle de la température en fonction de la fraction de mélange  $Z$ . On obtient la fraction du mélange moyenne  $\tilde{Z}$  et sa variance  $\tilde{Z}''$  du solveur CFD, ce qui permet de calculer la PDF et de faire l'intégration pour trouver les fractions dans le champ turbulent.

Code CFD	Programme de la flammelette
Equations résolues dans le code	Spécifier les valeurs pour $\chi_{st}$ entre 0 (l'équilibre chimique) et l'extinction. Calcul de $\chi(Z)$ à partir de $\chi_{st}$ pour chaque valeur de $\chi_{st}$ :
<ul style="list-style-type: none"> <li>Equation de continuité.</li> <li>Equation de la quantité de mouvement.</li> <li>Equation d'énergie.</li> <li>Equation de <math>\tilde{Z}</math> et <math>\tilde{Z}''^2</math>.</li> <li>Modèle de turbulence <math>k - \varepsilon</math>. (Correction de Pope).</li> </ul>	$\chi = \chi_{Zst} \frac{F(Z)}{F(Z_{st})}$ Résolution de l'équation de la flammelette pour chaque valeur de $\chi$ : $Y_k = Y_k(Z, \chi)$ $T = T(Z, \chi)$ Construction de $P_{\tilde{Z}, \tilde{Z}''^2}(Z)$ pour le calcul des valeurs turbulentes de $Y_k$ .

Bibliothèque des flammelette turbulentes
$\tilde{Y}_i = \tilde{Y}_i(\tilde{Z}, \tilde{Z}''^2, \tilde{\chi}_{st}) = \int_0^1 Y_i(Z, \chi_{st}) P_{\tilde{Z}, \tilde{Z}''^2}(Z) dZ$

Figure 4.4 Relation entre le code CFD et le générateur de flammelettes

## 4.6 Modélisation des émissions de NOx

Les NOx contribuent également à la formation de l'ozone troposphérique, des normes et directives strictes ont été établies pour limiter la quantité de NOx générée lors des processus de combustion. Ceci a été à l'origine de nombreuses études ayant pour but la prédiction des émissions de NOx. Le développement d'un modèle efficace pour prévoir la formation de ce polluant, lors de la combustion, exige une bonne description des réactions homogènes et hétérogènes entre l'azote, le combustible et l'espèce oxydante. Les mécanismes cinétiques doivent, en outre, être limités pour des réactions homogènes permettant un couplage efficace avec le processus de mélange turbulent.

### 4.6.1 Bref aperçu sur les NOx

A l'origine, la notion NOx désignait globalement NO et NO<sub>2</sub>. Par la suite elle a désigné tous les composés azoteux oxygénés de type gazeux : NO, NO<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, N<sub>2</sub>O et même HNO<sub>3</sub>.

Durant la combustion, l'azote de l'air ou du combustible réagit avec d'autres espèces pour former des polluants azotés tels que le NO, le NO<sub>2</sub>, le N<sub>2</sub>O, etc. Parlons un peu de ces polluants.

Le NO: Le monoxyde d'azote (NO) est produit à partir des trois mécanismes de formation: le NO thermique, le NO précoce et le NO combustible. Bowman, C.T ; De Soete. G.G ; Hill, S.C. et al. Et Miller, J.A. et al. [15 - 18], ont passé en revue sur les principaux détails concernant la formation et la destruction de cette espèce polluante.

Les NO thermiques sont formés à partir de l'oxydation de l'azote atmosphérique présent dans l'air de combustion, les NO précoces sont produits par les réactions de l'azote atmosphérique avec les radicaux hydrocarbonés présents dans les régions de la flamme riche en combustible, et les NO combustibles sont formés par l'oxydation de l'azote contenu dans le combustible. Les principales sources de formation de NO sont les NO thermiques dans les systèmes brûlant des combustibles gazeux.

Ces polluants peuvent être réduits par exemple via le mécanisme de reburning. Le mécanisme de destruction de NO consiste à créer une zone riche en combustible dans laquelle des quantités importantes des radicaux CHi sont produits. Ces radicaux réagissent avec les NO et forment des molécules HCN et/ou NH<sub>3</sub>, qui seront ensuite réduites en N<sub>2</sub>

Le NO<sub>2</sub>: En présence de l'oxygène, le monoxyde d'azote NO peut s'oxyder en dioxyde NO<sub>2</sub> selon la réaction:  $\text{NO} + 1/2\text{O}_2 \rightarrow \text{NO}_2$ . La position d'équilibre de cette réaction exothermique (avec  $\Delta H^\circ (298\text{K}) = -57 \text{ kJ}$ ) dépend de la température, de la teneur en oxygène et de la pression totale. Le NO<sub>2</sub> est très sensible à la dynamique des fluides dans la zone de flamme [19].

D'importantes quantités de NO<sub>2</sub> ont été mesurées, par exemple, dans les flammes de pré-mélange [20].

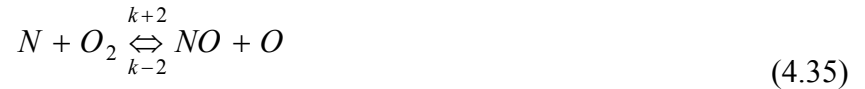
Dans les conditions de combustion classiques où la température est supérieure 1400°C, le NO est majoritaire. Quand la température baisse, le NO<sub>2</sub> devient l'espèce stable, mais la transformation peut être lente pour des raisons cinétiques. La transformation du NO en NO<sub>2</sub> tend à se produire là où un refroidissement rapide a lieu.

Par exemple dans les zones où l'air qui rentre au foyer se mélange avec les produits chauds de la combustion [20], mais surtout dans la cheminée voir directement dans l'atmosphère.

#### 4.6.2 Formation et réduction de NO thermique

Le NO est formé soit en phase gazeuse (réactions homogènes) soit à l'interface d'une phase solide et d'une phase gazeuse (réactions hétérogènes). En phase gazeuse (réactions homogènes) le NO est formé et réduit par au moins trois mécanismes : Le NO thermique, le NO combustible et le NO précoce.

Le NO thermique est formé à partir de l'oxydation de l'azote atmosphérique à des températures relativement élevées dans des zones pauvres en combustible. Ce processus est décrit par le mécanisme de Zeldovich à deux étapes :



Une troisième réaction est souvent ajoutée:



Les équations. (4.34), (4.35) et (4.6) représentent les réactions traduisant le mécanisme de Zeldovich élargi. Les constantes de vitesse des réactions  $k \pm 1$ ,  $k \pm 2$  et  $k \pm 3$  ont été mesurées expérimentalement par [21 - 23], Elles sont évaluées avec une équation d'Arrhenius de la forme :

$$k = A \exp\left(\frac{\theta}{T}\right) \quad (4.37)$$

Leurs valeurs numériques sont présentées dans le tableau 02:

Constante de vitesse [ $m^3/(kg.s)$ ]	A [ $m^3/(kg.s)$ ]	$\theta$ [K]
$k_{+1}$	$1.8 \times 10^8$	-38 370
$k_{-1}$	$3.8 \times 10^7$	-425
$k_{+2}$	$1.8 \times 10^4$	-4 680
$k_{-2}$	$3.8 \times 10^3$	-20 820
$k_{+3}$	$7.1 \times 10^7$	-450
$k_{-3}$	$1.7 \times 10^8$	-24 560

Table 02 : constantes de vitesse des réactions

La vitesse nette de formation de NO via les réactions (4.34) et (4.35) est calculée avec l'expression suivante :

$$\frac{d[NO]}{dt} = k_{+1}[O][N_2] + k_{+2}[N][O_2] + k_{+3}[N][OH] - k_{-1}[NO][N] - k_{-2}[NO][O] + k_{-3}[NO][H] \quad (4.38)$$

Toutes les concentrations sont exprimées en mol/m<sup>3</sup>.

En utilisant l'hypothèse de l'état quasi-stationnaire pour le radical N, on obtient l'expression suivante pour la variation, en fonction du temps, de la concentration des NO :

$$\frac{d[NO]}{dt} = 2k_{+1}[O][N_2] \frac{\left(1 - \frac{k_{-1}k_{-2}[NO]^2}{k_{+1}[N_2]k_{+2}[O_2]}\right)}{\left(1 + \frac{k_{-1}[NO]}{k_{+2}[O_2] + k_{+3}[OH]}\right)} \quad (4.39)$$

Finalement le terme source  $S_{NO}$  peut être calculé avec l'expression suivante:

$$S_{NO} = M_{NO} \frac{d[NO]}{dt} \quad (4.40)$$

Où  $M_{NO}$ , est la masse molaire de NO en g/mol. Ce terme source est, ensuite, introduit dans l'équation de transport de NO :

$$\frac{\partial(\rho Y_{NO})}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i Y_{NO}) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[ \rho D \frac{\partial Y_{NO}}{\partial x_i} \right] + S_{NO} \quad (4.41)$$

Où  $Y_{NO}$ ,  $S_{NO}$  sont la fraction massique et le terme source de NO,  $u_i$  et D sont les trois composantes de la vitesse et le coefficient de diffusion, respectivement.

Pour pouvoir déterminer la vitesse de formation de NO par l'équation (4.39), en plus des concentrations des espèces stables de O<sub>2</sub> et de N<sub>2</sub>, il est nécessaire de calculer la concentration des atomes d'Oxygène et des radicaux libres OH.

### 4.6.3 Calcul de la concentration de l'oxygène monoatomique

Plusieurs méthodes existent pour calculer la concentration de l'oxygène monoatomique (O) [24]. Une première approche considère que la vitesse de formation des *NO* thermiques est beaucoup plus lente que la vitesse d'oxydation des hydrocarbures. On peut donc considérer que les *NO* thermiques se formeront une fois que le processus de la combustion s'achèvera. Par conséquent, la formation des *NO* thermiques peut être découplée du mécanisme «principal» de combustion. Par ailleurs, la vitesse de formation des *NO* pourra être calculée en considérant que les réactions de combustion se trouvent à l'équilibre. Pour calculer la concentration de l'oxygène monoatomique, on suppose l'équilibre *O/O<sub>2</sub>* dans la réaction :



Westenberg [25] propose l'expression suivante pour l'évaluer :

$$[O] = 3.97 \times 10^5 T^{-\frac{1}{2}} [O_2]^{\frac{1}{2}} \exp\left(\frac{-31090}{T}\right) \quad (4.43)$$

Avec T en Kelvin et [O] en mol/m<sup>3</sup>.

La méthode précédente peut être améliorée si, dans le processus de dissociation recombinaison de l'O<sub>2</sub>, on fait intervenir les réactions du tiers corps [26], c'est-à-dire :



Dans ce cas nous pouvons à remplacer l'équation (4.43) par l'expression :

$$[O] = 36.64 T^{-\frac{1}{2}} [O_2]^{\frac{1}{2}} \exp\left(\frac{-27123}{T}\right) \quad (4.45)$$

Avec cette expression, des concentrations plus élevées de [O] sont obtenues.

#### 4.6.4 Calcul de la concentration des radicaux OH

Le calcul de la concentration des radicaux  $OH$  est nécessaire quand le mécanisme de Zeldovich élargi est retenu. A partir des travaux de Baulch et al. [27] et de Westbrook et al. [28] l'équation donnant cette concentration est donnée par:

$$[OH] = 2.129 \times 10^2 T^{-0.57} [O_2]^{1/2} [H_2O]^{1/2} \exp\left(\frac{-4595}{T}\right) \quad (4.46)$$

Avec  $T$  en Kelvin et  $[OH]$  en  $mol/m^3$ .

## Bibliographie

1. Veynante, D. et Vervisch, L. (2002). **Turbulent combustion modeling**. Progress in energy and combustion science 28 (3),193-266.
2. Marble, F. E. et Broadwell, J.E.(1977).**The Coherent Flame Model for Turbulent Chemical Reactions**. Project SQUID, Technical Report TRW-9-PV .
3. Jones, W. P. et Musonge, P.(1988).**Closure of the Reynolds stress and scalar flux Equations**. *Physics of Fluids*, American Institute of Physics, 31(12),3589-3604
4. T. Mantel, T. et Borghi, R.(1994). **A new model of premixed wrinkled flame propagation based on a scalar dissipation equation**. Combustion and Flame,96,443-457.
5. Ferreira, J.C. (1996). **Flamelet modeling of stabilisation in turbulent non premixed combustion**. Ph. D Dissertation, ETHZ, Switerland.
6. Mamerie, A. (2009). **Etude numérique de la combustion turbulente du prémélange pauvre méthane/air enrichi à l'hydrogène**. Thèse de doctorat, Université d'Orléans, France.
7. Kuo, K. K.(1986). **Principles of Combustion**. New York: John Wiley & Sons.
8. Burke, S. P. et Schumann, T. E.W.(1928).**Diffusion Flames**. *industrial and Engineering Chemistry*, 20(10),998-1004.
9. Hadeif, A.; Aouachria, Z.; et Rezgui, Y. (2016). **Reduction of no formation by thermal effect of a turbulent diffusion flame H2/Air modeled by the concept of laminar flamelet**. *Journal of Engineering Science & Technology*, 11(3), 383 – 396.
10. Poinot, T. et Veynante, D. (2005). **Theoretical and numerical combustion**.R.T. Edwards.
11. Hadeif, A.; et Ouachria, Z. (2013). **The interactions of the kinetic chemistry and the turbulence on the turbulent diffusion flame**. International Conference on Mathematical Sciences and Statistics. AIP Conference Proceedings, 1557, 174-179.
12. Thierry .P et Denis V. (2005).**Theoretical and Numerical Combustion**. R.T. Edwards, Flourtown, PA.

13. Peters, N. (1986). **Laminar flamelet concepts in turbulent combustion.** 21st Int. Symposium on Combustion. Pittsburgh: the combustion institute,1231-1250.
14. Peters,N. (2000). **Turbulent combustion.** Cambridge University Press.
15. Bowman, C.T. (1991). **Chemistry of gaseous pollutant formation and destruction.** Fossil Fuel Combustion éditeurs,Canada.
16. De Soete. G.G. (1989). **Mécanismes de formation et de destruction des oxydes d'azote dans la combustion.** Revue Générale de Thermique, 28(330-331), pages 353–373.
17. Hill, S.C. et Smoot, L.D.(2000).**Modeling of nitrogen oxides formation and destruction in combustion systems.** *Progress in Energy & Combustion Science.* (26), pages 417–458.
18. Miller, J.A. et Bowman, C.(1989). **Mechanism and modeling of nitrogen chemistry in combustion.** *Progress in Energy Combustion Science.* (15), pages 287–338.
19. Driscoll, F.G.; Chen, R.H.; et Yoon, Y. (1992). **Nitric oxide levels of turbulent jet diffusion flames:effects of residence time and Damkohler number.***Combustion and Flame*,88(1),37-49.
20. Hori, M. (1988). **Nitrogen dioxide by the mixing of hot combustion gas with cold air.** Twenty-second symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute, Pittsburgh, PA, 1175-1181
21. Blauwens, J.; Smets, B.; et Peeters, J. (1976).**Mechanism of prompt NO formation in hydrocarbon flames.** *6<sup>th</sup> symposium on Combustion*, 16(1), 1055-1064
22. Flower, W.L.; Hanson, R.K. et Kruger, C.H. (1974). **Investigation of nitric oxide decomposition in the temperature range 2500-4100 K.** *5<sup>th</sup> symposium International on Combustion.* The Combustion Institute, Pittsburgh, PA. 823-832.
23. Monat, J.P.; Hanson, R.K. et Kruger, C.H. (1979).**Shock tube determination of the rate coefficient for the reaction  $O + N_2 \rightarrow N + NO$ .** *7<sup>th</sup> Symposium on Combustion*,17(1), 543-552.
24. Alzueta, M. U. ; Glarborg, P. et Dam-Johansen, K. (1997).**Low temperature interactions between hydrocarbons and nitric oxide : An experimental study.** *Combustion and Flame*, 109(1), 25-36.

25. Westenberg, A. A. (1971). **Kinetics of NO and CO in lean, premixed hydrocarbon-air flames.** *Combustion Science and Technology*, (4), 59–64,
26. Warnatz, J. (2001). **NO<sub>x</sub> formation in High Temperature Processes.** University of Stuttgart, Germany
27. Baulch, D.L.; Bowman, C.T.; Cobos, C.J.; Cox, R.A.; Just, Th.; Kerr, J.A.; Pilling, M.J.; Stocker, D.; Troe, J.; Tsang, W.; Walker, R.W. et Warnatz, J. (2005). **Evaluated kinetic data for combustion modelling supplement II.** *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, 34(2), 757-1397.
28. Westbrook, C.K. et Dryer, F.L. (1984). **Chemical kinetic modelling of hydrocarbon on combustion.** *Progress in Energy and Combustion Science*, 10(1), 1-57.

## 5. Méthode numérique de résolution

### 5.1 Résolution des équations de mouvement

Les méthodes numériques les plus utilisées pour résoudre les équations de la dynamique des fluides transforment celles-ci sous forme discrétisée. Par conséquent, les équations aux dérivées partielles sont transformées en équations algébriques faciles à résoudre. Fluent, le logiciel que nous utilisons, emploie la méthode des volumes finis pour obtenir ces expressions algébriques. Le résultat final de la discrétisation est un ensemble d'équations algébriques qui nous permettent de prédire la masse, la quantité de mouvement, l'énergie et les espèces chimiques dans tous les nœuds du maillage du domaine de calcul.

La discrétisation des équations gouvernant le comportement d'une particule fluide peut être illustrée en considérant, dans un cas stationnaire, l'équation de conservation d'une quantité scalaire

$\phi$  :

$$\underbrace{\oint \rho \phi \vec{v} \cdot d\vec{A}}_{\text{terme convectif}} = \underbrace{\oint \Gamma_{\phi} \nabla \phi \cdot d\vec{A}}_{\text{terme diffusif}} + \underbrace{\int_V S_{\phi} dV}_{\text{terme source}} \quad (5.1)$$

Où :

$\rho$  : masse volumique

$\vec{v}$  : vecteur vitesse

$d\vec{A}$  : vecteur surface

$\Gamma_{\phi}$  : coefficient de diffusion  $\phi$

$\nabla \phi$  : gradient de  $\phi$

$S_{\phi}$  : source de  $\phi$  par unité de volume

$dV$  : volume élémentaire

Dans un cas stationnaire et pour un écoulement incompressible et Newtonien avec  $\mu$  et  $c_p$  constantes l'équation (5.1) donne pour:

- l'équation de continuité si  $\phi = 1, \Gamma_\phi = 0$  et  $S_\phi = 0$
- l'équation de quantité de mouvement dans la direction x si  $\phi = u_x, \Gamma_\phi = \mu$  et  $S_\phi = \rho g \vec{i} - \text{grad } p \cdot \vec{i}$
- l'équation de quantité de mouvement dans la direction y si  $\phi = u_y, \Gamma_\phi = \mu$  et  $S_\phi = \rho g \vec{j} - \text{grad } p \cdot \vec{j}$
- l'équation de conservation de l'énergie pour la température si  $\phi = T, \Gamma_\phi = \frac{\mu}{Pr}$  et  $S_\phi = 0$
- l'équation de conservation de concentration des espèces chimique si  $\phi = Y_i, \Gamma_\phi = \frac{\mu}{Sc}$  et  $S_\phi = 0$

La discrétisation de l'équation (5.1) dans la maille centrée en P du domaine montré sur la Figure 5.1. Donne :

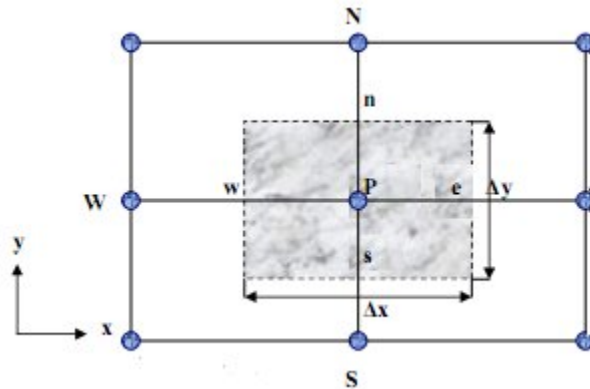


Figure 5.1 : Volume de contrôle bidimensionnel

$$\underbrace{\sum_f^{N \text{ faces}} \rho_f \phi_f \vec{v} \cdot \vec{A}_f}_{\text{terme convectif}} = \underbrace{\sum_f^{N \text{ faces}} \Gamma_f (\nabla \phi)_n \cdot \vec{A}_f}_{\text{terme diffusif}} + \underbrace{S_\phi V}_{\text{termes source}} \quad (5.2)$$

Où :

$N_{faces}$  : nombre de faces formant la maille

$\phi_f$  : valeur de  $\phi$  convectée à travers la face

$\rho_f \phi_f \vec{v} \cdot \vec{A}_f$  : flux de masse à travers la face

$\vec{A}_f$  : surface de f

$(\nabla \phi)_n$  : norme du  $\nabla \phi$  dans la direction normale à la face f

$V$  : volume de la maille

Après le développe de cette équation on obtient :

$$\begin{aligned}
 (\rho u \phi)_e \Delta y - (\rho u \phi)_w \Delta y + (\rho v \phi)_n \Delta x - (\rho v \phi)_s \Delta x = & \Gamma_e (\nabla \phi \vec{i})_e \cdot \vec{A}_e + \Gamma_w (\nabla \phi \vec{i})_w \cdot \vec{A}_w \\
 & + \Gamma_n (\nabla \phi \vec{j})_n \cdot \vec{A}_n + \Gamma_s (\nabla \phi \vec{j})_s \cdot \vec{A}_s \\
 & + S_\phi \Delta x \Delta y
 \end{aligned} \quad (5.3)$$

Par défaut, Fluent stocke les variables  $\phi$  au centre des mailles; les valeurs sur les faces  $\phi_f$  ( $\phi_e, \phi_w, \phi_n$  et  $\phi_s$ ), qui apparaissent dans le terme convectif de l'équation (5.3) doivent être calculées par interpolation à partir des valeurs aux centres des mailles. Cela se fait en utilisant un schéma du type ' ' amont ' ' ( upwind en anglais); Les grandeurs  $\phi_f$  sont calculées à partir des valeurs de  $\phi$  dans la cellule placée en amont par rapport à la direction de la vitesse normale à la face de la maille. Plusieurs schémas de type amont existent. On cite parmi eux schéma du premier ordre, du second ordre, schéma QUICK [1,2] et schéma de loi de puissance [3]. Dans cette étude nous avons utilisé les deux premiers.

### 5.1.1 Schéma amont de premier ordre (first order upwind)

Pour expliquer le schéma amont premier ordre (APO), prenons le cas illustré sur la Figure 5.1. Pour la cellule  $P$ ,  $\vec{v}$  et  $\vec{n}_e$  sont, respectivement, le vecteur vitesse et le vecteur surface. Si l'on s'intéresse aux valeurs des scalaires sur la face  $e$ , le schéma APO postule :

$$\phi_e = \begin{cases} \phi_P & \text{si } (\vec{v} \cdot \vec{n}_e) > 0; \\ \phi_E & \text{si } (\vec{v} \cdot \vec{n}_e) \leq 0 \end{cases} \quad (5.4)$$

Ceci est le seul schéma qui n'aboutisse jamais à des solutions oscillatoires et en conséquence il représente un schéma très stable. Cependant, il est numériquement diffusif. Un développement limité de Taylor aux environs du point  $P$  donne (pour un maillage orthogonal et  $\vec{v} \cdot \vec{n} > 0$ ) :

$$\phi_e = \phi_P + \frac{\Delta x}{2} \left( \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_P + \frac{1}{2} \left( \frac{\Delta x}{2} \right)^2 \left( \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right)_P + H \quad (5.4)$$

où  $H$  dénote les termes d'ordre supérieur. Un schéma de premier ordre retient seulement le premier terme du côté droit de l'équation (5.4), c'est-à-dire  $\phi_P$ . Nous remarquons que l'erreur de troncature

créée, quand on calcule  $\phi_e$  de cette façon,  $f_e^d$ , a la forme d'un flux diffusif :

$$f_e^d = \Gamma_e \left( \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_e \quad (5.6)$$

Cette diffusion numérique est amplifiée si le débit n'est pas perpendiculaire à la cellule. L'erreur de troncature produira donc une diffusion non seulement dans la direction normale à l'écoulement mais aussi dans la direction transversale. De Vahl Davis et Mallison [4] ont suggéré l'expression suivante pour quantifier la diffusion numérique dans une situation 2D :

$$f^d = \frac{\rho U \Delta x \Delta y \sin 2\theta}{4(\Delta y \sin^3 \theta + \Delta x \cos^3 \theta)} \quad (5.7)$$

Où  $U$  est la norme de la vitesse et  $\theta$  est l'angle (variant de  $0^\circ$  à  $90^\circ$ ) entre le vecteur vitesse et la direction  $x$ . A partir de l'équation (5.7) on peut conclure qu'il n'y aura pas de diffusion numérique

si l'écoulement est aligné sur un des axes du maillage. Pour réduire la diffusion numérique, il est nécessaire d'utiliser des maillages très fins pour les valeurs de  $\Delta x$  et  $\Delta y$  les plus petites possibles. La diffusion numérique peut être aussi réduite en utilisant un schéma d'ordre supérieur tel que le schéma amont deuxième ordre (ADO).

### 5.1.2 Schéma amont deuxième ordre

Quand le schéma ADO est utilisé, la valeur de  $\phi$  sur la face  $f$ ,  $\phi_f$ , est calculée en utilisant l'expression :

$$\phi_f = \phi + \nabla \phi \cdot \Delta \vec{s} \quad (5.8)$$

où  $\phi$  et  $\nabla \phi$  sont respectivement, la valeur dans le centre de la cellule et son gradient évalué dans la cellule amont.  $\Delta \vec{s}$  est le vecteur de position allant du centre de la cellule au centre de la face  $f$ . Le gradient  $\nabla \phi$  est évalué en utilisant le théorème de la divergence, dit de Gauss Ostrogradski, dans sa forme discrète s'écrit :

$$\nabla \phi = \frac{1}{V} \sum_f^{N_{\text{face}}} \tilde{\phi}_f \vec{A}_f \quad (5.9)$$

$\tilde{\phi}_f$  est calculé en moyennant  $\phi$  sur les deux cellules adjacentes à la face. L'application de ce schéma de discrétisation donne :

$$\phi_e = \phi_p + \nabla \phi_p \cdot \Delta \vec{s} \quad (5.10)$$

Avec

$$\begin{aligned}
\nabla \phi_P \cdot \Delta \vec{s} &= \frac{1}{\Delta x \Delta y} \left( \tilde{\phi}_e \Delta y \vec{i} + \tilde{\phi}_w \Delta y (-\vec{i}) + \tilde{\phi}_n \Delta x \vec{j} + \tilde{\phi}_s \Delta x (-\vec{j}) \right) \frac{\Delta x}{2} \vec{i} \\
&= \frac{1}{\Delta x \Delta y} \left( \tilde{\phi}_e \frac{\Delta x \Delta y}{2} + \tilde{\phi}_w \frac{\Delta x \Delta y}{2} \right) \\
&= \frac{1}{2} \left[ \left( \frac{\phi_E + \phi_P}{2} \right) - \left( \frac{\phi_W + \phi_P}{2} \right) \right] \\
&= \frac{\phi_E + \phi_W}{4}
\end{aligned} \tag{5.11}$$

Donc,  $\phi_e$  sera égale à :

$$\phi_e = \phi_P + \frac{1}{4} (\phi_E - \phi_W) \tag{5.12}$$

### 5.1.3 Evaluation du terme diffusif

Le terme diffusif sur l'équation (5.2) est calculé avec l'expression :

$$\Gamma_f (\nabla \phi)_n \cdot \vec{A} = \Gamma_f \frac{(\phi_1 - \phi_0)}{ds} \frac{\vec{A} \cdot \vec{A}}{\vec{A} \cdot \vec{e}_s} + \Gamma_f \left( \nabla \phi \cdot \vec{A} - \nabla \phi \cdot \vec{e} \frac{\vec{A} \cdot \vec{A}}{\vec{A} \cdot \vec{e}_s} \right) \tag{5.13}$$

Le premier terme du côté droit de l'équation (5.13) représente la diffusion primaire dirigée suivant  $\vec{e}_s$  et le deuxième terme représente la diffusion secondaire. Dans cette équation,  $\vec{A}$  est le vecteur surface normal à la face  $f$  dirigé de la cellule  $c_0$  à la cellule  $c_1$ ,  $ds$  est la distance entre les centres de gravité des cellules, et  $\vec{e}_s$  est le vecteur unitaire dans la direction  $ds$ .

Le terme  $\nabla \phi$  dans l'équation (5.13) est calculé avec l'expression (5.9). Le schéma de discrétisation employé pour calculer le terme diffusif sur l'équation (5.2) est du type centré de deuxième ordre.

L'application de l'équation (5.13) à la face  $e$ , dans le cas illustré sur la Figure 5.1, donne:

$$\Gamma_e (\nabla \phi \vec{i})_e \cdot \vec{A} = \Gamma_e \frac{(\phi_E - \phi_P)}{\Delta x} \Delta y \tag{5.14}$$

Les équations (5.4) ou (5.12) et (5.14) sont introduites dans l'équation de convection/diffusion discrétisée (Eq. 5.3) pour aboutir ainsi à une équation linéaire de la forme :

$$\begin{aligned} a_p \phi_P &= a_E \phi_E + a_N \phi_N + a_S \phi_S + b \\ a_p \phi_P &= \sum_{\text{voisin}} a_{\text{voisin}} \phi_{\text{voisin}} + b \end{aligned} \quad (5.15)$$

Dans le cas illustré sur la Figure 5.1 et utilisation d'un schéma APO, les coefficients

$a_p, a_E, a_W, a_N, a_S$  et  $b$  sont donnés par les expressions suivantes:

$$\begin{aligned} a_E &= \Gamma_e \frac{\Delta y}{\Delta x}; & a_W &= (\rho u)_e \Delta y + \Gamma_w \frac{\Delta y}{\Delta x} \\ a_N &= \Gamma_n \frac{\Delta y}{\Delta x}; & a_S &= (\rho u)_s \Delta x + \Gamma_s \frac{\Delta x}{\Delta y} \\ a_E &= a_E + a_W + a_N + a_S & b &= S_\phi \Delta x \Delta y \end{aligned} \quad (5.16)$$

Dans chaque cellule du maillage, et pour chaque équation de conservation, on aura une équation linéaire du même type que l'équation (5.15). A la fin, on aboutit à un système d'équations algébriques qui peut être résolu en appliquant la méthode itérative implicite de Gauss-Seidel couplée à une méthode multi-grille algébrique (AMG) proposée par Hutchinson et Raithby [5].

Les schémas de discrétisation des termes convectif et diffusif sont utilisés pour évaluer  $\phi$  et le gradient de  $\phi$  aux faces des mailles quand les propriétés physiques et le vecteur vitesse au centre des cellules sont connus. Cependant, pour résoudre les équations de Navier-Stokes, les valeurs de la vitesse et de la pression au centre des mailles ne sont pas connues a priori. Pour résoudre ces équations, Fluent utilise une stratégie de solution qui fait appel à la forme incompressible des équations de la dynamique. Cette stratégie est un processus itératif qui consiste à supposer une valeur pour la pression, grâce à laquelle on calcule la vitesse. la vitesse ainsi obtenue est introduite dans l'équation de la continuité; si cette équation est vérifiée on arrête les itérations et on passe à l'équation suivante (énergie, espèces, etc.) sinon, on recommence les itérations. Dans la section suivante nous allons expliquer la façon utilisée pour résoudre l'équation de quantité de mouvement.

### 5.1.4 Discrétisation de l'équation de quantité de mouvement

Pour résoudre les équations quantité de mouvement discrétisées, Fluent utilise une stratégie de solution qui fait appel à la forme incompressible des équations de la dynamique. Ceci implique que le terme  $\partial u_i / \partial x_i$ , qui est une mesure de la compressibilité de l'écoulement, soit égal à zéro. Cela est toujours vrai pour un fluide incompressible. Pour un fluide compressible, ou pour des écoulements avec des changements de masse volumique qui sont dûs à la variation de, par exemple, la température, mais s'écoulant à faible vitesse (nombre de Mach  $\leq 0,25$ ), le terme  $\partial u_i / \partial x_i$  peut être aussi considéré égal à zéro. Donc, le raccordement entre les équations de continuité et de la quantité de mouvement à travers la densité peut être utilisé pour déterminer les valeurs de pression. Les méthodes basées sur cette approche sont nommées « méthodes découplées » (segregated solvers en anglais) à cause de la séparation entre la solution directe de la pression et la prédiction de vitesse.

Sur Fluent, la séparation se fait en résolvant directement les équations de la dynamique pour la vitesse et la pression. Cela peut se faire grâce à l'introduction d'une équation supplémentaire pour la pression, c'est le cas des approches connues sous le nom de Simple [3], Simplec [6] ou PISO [7, 8]. Nous utilisons un algorithme de type Simple car c'est l'algorithme le plus rapide et le plus robuste des ces trois algorithmes [9].

L'algorithme Simple utilise une relation qui lie la vitesse et la pression de telle sorte que l'équation de conservation de la masse soit vérifiée

Les équations de conservation de la masse et de la quantité de mouvement peuvent être écrites, toujours dans le cas présenté sur la figure 5.1, comme suit :

$$\sum_f^{N_{faces}} (\rho \vec{v}) \cdot \vec{A}_f = 0 \quad (5.17)$$

$$a_p u_p = \sum_{voisin} a_{voisin} u_{voisin} + \sum_f^{N_{faces}} p_f A_f \vec{j} + S \quad (5.18)$$

Pour un champ de pression connu, l'équation (5.18) peut être résolue, mais ce n'est pas le cas ici. Pour les autres directions, l'équation de quantité de mouvement peut être écrite de façon similaire. Donc, pour résoudre cette équation ? il est nécessaire d'estimer le champ de pression. A moins que l'estimation du champ de pression soit la bonne, le champ de vitesse résultant ne satisfera pas l'équation de continuité. Le champ de vitesse obtenu avec un tel champ de pression  $p^*$  sera noté par  $u^*$ ,  $v^*$  et  $w^*$ , donc l'équation (5.18) devient :

$$a_p u_p^* = \sum_{\text{voisin}} a_{\text{voisin}} u_{\text{voisin}}^* + \sum_f^{N_{\text{faces}}} p_f^* A_f \vec{i} + S \quad (5.19)$$

Pour corriger l'estimation de  $p^*$ , une pression de correction  $p'$ , est utilisée :

$$p = p^* + p' \quad (5.20)$$

$p$  est la pression corrigée.  $p$  deviendra  $p^*$  si le champ de vitesse, calculé avec  $p^*$ , n'assure pas la continuité. Les corrections de vitesse sont écrites de façon similaire, c'est-à-dire :

$$u = u^* + u' \quad v = v^* + v' \quad w = w^* + w' \quad (5.21)$$

Si on soustrait l'équation (5.19) de l'équation (5.18) on obtient une expression de la forme :

$$a_p u_p' = \sum_{\text{voisin}} a_{\text{voisin}} u_{\text{voisin}}' + (p_w' - p_e') A_e \quad (5.22)$$

Le terme  $\sum a_{\text{voisin}} u_{\text{voisin}}'$  est éliminé de l'équation (5.2). En effet, si ce terme était retenu, les équations de correction deviendraient insolubles. L'omission de ce terme nous permet d'obtenir une équation pour  $p'$  semblable à celle obtenue pour une variable quelconque,  $\phi$ . On a donc :

$$a_p u_p' = (p_e' - p_w') A_e \quad (5.23)$$

Il vient donc:

$$u_p = u_p^* + \frac{A_e}{a_p} (p_e' - p_w') \quad (5.24)$$

Le schéma Presto (PREssure STaggering Option) est employé pour calculer la pression sur chaque face de la maille. Ce schéma est le plus adapté pour les écoulements rotatifs, les domaines courbés et pour les simulations où un milieu poreux est utilisé.

Pour calculer la pression sur les faces, le schéma Presto emploie l'équation de continuité discrétisée pour un volume de contrôle "décalé" jusqu'aux faces des mailles, voir Figure (5.2)

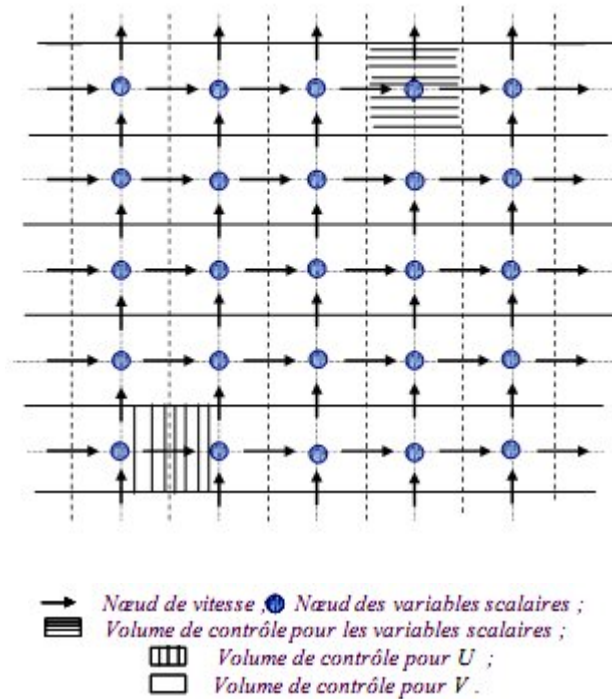


Figure 5.2 : Schéma du maillage décalé

L'équation (5.24) montre comment la vitesse estimée  $u_p^*$  doit être corrigée en fonction des corrections de pression. L'algorithme Simple introduit l'équation (5.24) dans l'équation discrétisée de la continuité éq. (5.17). Ceci aboutit à une expression de la forme :

$$a_p p' = \sum_{\text{voisin}} a_{\text{voisin}} P'_{\text{voisin}} + B \quad (5.25)$$

avec :

$$B = \sum_f^{N \text{ faces}} (\rho u_f^* A_f) \quad (5.26)$$

L'équation de continuité est utilisée donc comme une équation pour la pression. Afin d'éviter la divergence de l'équation de correction de pression, la pression  $p'$  doit être sous-relaxée i.e. seulement une fraction de  $p'$  sera ajoutée  $p^*$ . L'expression suivante sera utilisée à la place de l'équation (5.20) :

$$p = p^* + \alpha_p p' \quad (5.27)$$

Où  $\alpha_p$  est un facteur de sous-relaxation.

### 5.1.5 Sous relaxation

Pour les équations non linéaires, il est nécessaire de contrôler le changement d'un scalaire  $\Phi$  lors de la résolution. La sous relaxation réduit ce changement durant chaque itération. La nouvelle valeur dépend donc de la valeur précédente et de l'écart entre les deux valeurs :

$$\Phi = \Phi_{old} + \alpha \Delta \Phi \quad (5.28)$$

Dans notre cas, les valeurs de sous relaxation sont données dans le tableau (5.1) :

Tableau 5.1 : Valeurs de sous relaxation

Pression	Quantité de Mouvement	Energie cinétique de turbulence k	Taux de dissipation turbulent $\varepsilon$	Viscosité turbulente $\mu_t$	Fraction De mélange Z	Variance de fraction de mélange Z''
0.9	0.7	0.8	0.8	1	1	0.9

En résumé, la procédure à suivre pour résoudre les équations de Navier-Stokes dans le cas d'un écoulement incompressible à l'aide d'un solveur découplé, comporte les pas suivants:

1. Proposer un champ de pression  $p^*$
2. Résoudre les équations de conservation de la quantité de mouvement pour obtenir  $u^*, v^*$  et  $w^*$ .
3. Résoudre l'équation de correction de pression (Eq. (5.25)),
4. Calculer  $p$  par la relation  $p = p^* + \alpha_p p'$ ,
5. Calculer  $u, v$  et  $w$ , à partir de  $u^*, v^*$  et  $w^*$  en utilisant les équations de correction (Eq.5.24),
6. Traiter la pression trouvée  $p$  comme une nouvelle pression estimée  $p^*$  et recommencer à partir de l'étape 2 jusqu'à atteindre la convergence.
7. Une fois l'équation de continuité est résolue, on passe à la résolution des équations de conservation de l'énergie et des espèces.

## Bibliographie

1. Leonard, B.P.; Mokhtari, S. (1990). **non oscillatory convection schemes for high speed steady multidimensional flow**. nasa TM 1-2568 (icomp-90-12), nasa Lewis Research Center.
2. Using the Solver, **Fluent User's Guide V 6.1**, Chapitre 24. Fluent Inc., 2003.
3. Patankar, S.V. (1980). **Numerical Heat Transfer and Fluid Flow, Chapter five: convection and diffusion**. Hemisphere Publishing Corporation, 41977,96-100.
4. G. De Vahl Davis, G. et Mallinson, G.D.(1972). **False diffusion in numerical fluid mechanics**.School of Mechanical and Industrial Engineering, University of New South Wales Sidney,Report FMT
5. Hutchinson, B.R. ; Raithby, G.D.(1986). **A multigrid method based on the additive correction strategy** . Numerical Heat Transfer, 9, 511–537.
6. Van Doormal, J.P; Raithby, G.D.(1984). **Enhancements of the simple method for predicting incompressible fluid flows**. Numerical Heat Transfer, 7, 147–163.
7. Issa, R.I.(1986). **Solution of the implicitly discretised fluid flow equations by operator splitting**. Journal of Computational Physics, 62, 40 – 65.
8. Issa, R.I. ; Gosman, A.D. et A.P. Watkins, A.P.(1986). **The computation of compressible and incompressible recirculating flows**. Journal of Computational Physics, 62, 66 –82.
9. Eaton, A.M.; Smoot, L.D.; Hill, S.C.; et Eatough, C.N. (1999). **Components, formulations,solutions, evaluation and application of comprehensive combustion models**. Progress in Energy and Combustion Science, 25, 387-436.

## 6. Résultats et discussion

### 6.1 Premier cas (Flamme de diffusion turbulente H<sub>2</sub>/Air)

#### 6.1.1 Description du problème physique et conditions aux limites

Le modèle étudié dans ce travail est composé d'un injecteur coaxial H<sub>2</sub>-N<sub>2</sub>/Air pénétrant dans une chambre de combustion cylindrique (figure 6.1). Le jet du carburant (50 % H<sub>2</sub>-50 % N<sub>2</sub>) est injecté au centre et entouré par un jet d'air nécessaire pour le développement de la flamme de diffusion, ce model est similaire à la configuration expérimentale investie par Hwang et al [1], où le diamètre du jet central d'hydrogène  $D_f = 0.006$  m avec une vitesse moyenne  $U_f =$  de 25 m/s (figure 6.2), et un co-courant d'air entrant dans une enceinte cylindrique d'une vitesse moyenne  $U_a =$  5 m/s (figure 6.3) et de rayon  $R_a = 0.15$ m, qui représente une chambre de combustion de rayon  $R_c = 0,25$  m avec une longueur  $L = 2$  m.

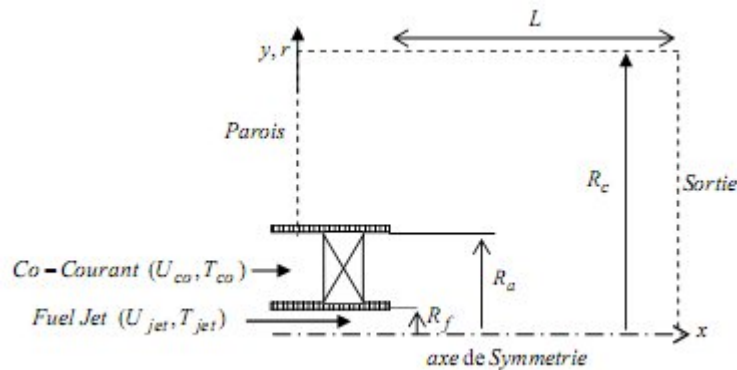


Figure 6.1 : Géométrie de la chambre

Pour le premier test, les fluctuations de vitesse sont  $u' = 0.19$  m/s et  $v' = 0.07$  m/s. L'intensité de turbulence est près de 2.5% de la vitesse moyenne avec l'hypothèse de  $v' = w'$ . Pour le deuxième test, lorsque le générateur de turbulence est utilisé, les fluctuations de vitesse augmentent de 3 à 7 fois par rapport à celles mentionnées ci-dessus, et qui donnent des valeurs pour  $u' = 0.52$  m/s et  $v' = 0.50$  m/s. Par conséquent, lorsque le générateur de turbulence est utilisé, les fluctuations de vitesse

de l'air ont une intensité de turbulence correspondant à 10.1 % de la vitesse moyenne. Cependant, la vitesse moyenne du flux d'air n'a pas changé. Ce résultat montre que le générateur de turbulence utilisé dans cette étude peut augmenter l'intensité de turbulence 4 fois sous la condition d'une vitesse moyenne identique.

L'énergie cinétique de turbulence du flux d'air (figure 6.4) [2] et son taux de dissipation [3] (figure 6.5) sont exprimés par:

$$\bar{k} = 2(\bar{u}'^2 + 2\bar{v}'^2) \quad (6.1)$$

$$\varepsilon = \frac{\bar{k}^{3/2}}{0.3D_h} \quad (6.2)$$

◆ Entrée de jet ( $x = 0$ ) :

$$r \langle R_f : \rho = \rho_f, T = T_f, u = u_f \text{ (Pr ofil, figure 6.2)}, v = 0, Y_i = Y_f \text{ avec } i = 1, 2, n$$

◆ Entrée d'air :

$$R_f \langle r \langle R_a : \rho = \rho_a, T = T_a, u = u_a, v = 0 \text{ (Pr ofil, figure 6.3)}, Y_i = Y_{ia} \text{ avec } i = 1, 2, n$$

◆ A la sortie ( $x = 2 \text{ m}$ ) :

$$v = 0, \frac{\partial u}{\partial x} = 0, \frac{\partial Y_i}{\partial x} = 0, \frac{\partial T_i}{\partial x} = 0 \text{ avec } i = 1, 2, n$$

◆ Sur l'axe de symétrie, les conditions suivantes sont imposées :

$$v = 0, \frac{\partial u}{\partial x} = 0, \frac{\partial Y_i}{\partial r} = 0, \frac{\partial T}{\partial r} = 0, \frac{\partial \rho}{\partial r} = 0 \text{ avec } i = 1, 2, n$$

◆ Sur les parois de la chambre la condition de non glissement est appliquée

( $r = R_c, 0 \langle x \langle 2 \text{ m}$ ) :

$$u = v = 0, T = T_{paroi}, \frac{\partial Y_i}{\partial r} = 0, \text{ avec } i = 1, 2, n$$

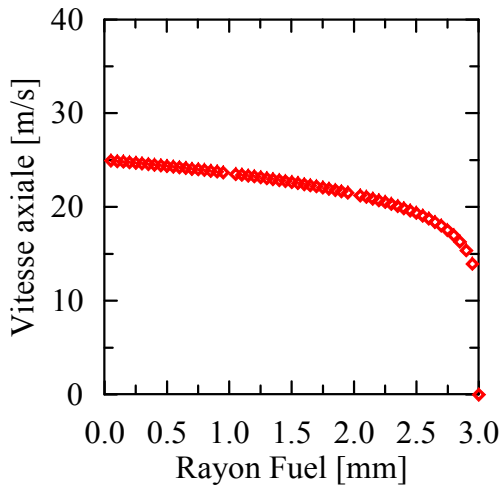


Figure 6.2 Profil de vitesse du jet central

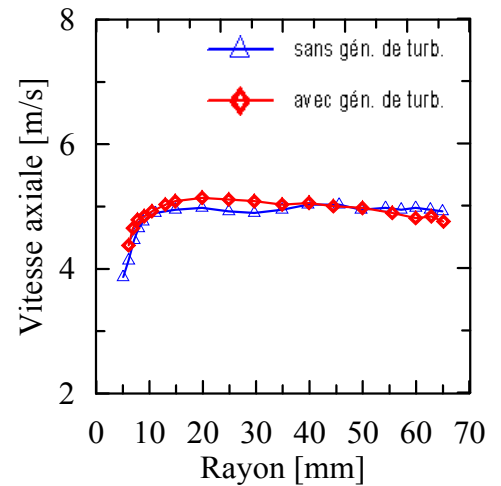


Figure 6.3 Profil de vitesse axiale du co-courant

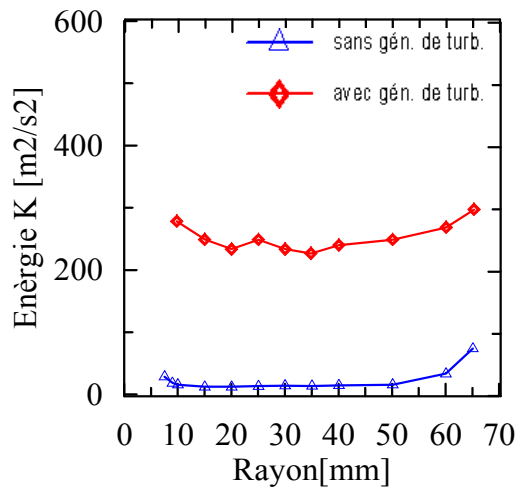


Figure 6.4 Profil d'Énergie cinétique du co-courant

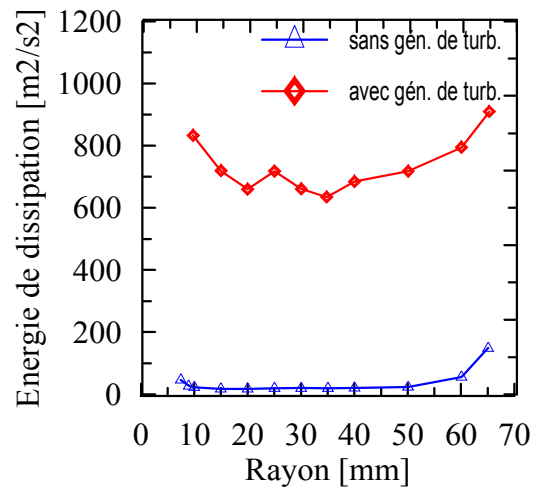


Figure 6.5 : Profil de l'énergie de dissipation du co-courant

### 6.1.2 Résultat et discussion

Les évolutions radiales de la température sont représentées sur les figures 6.6 et 6.7. Dans la première position,  $x = 60\text{mm}$ , les calculs donnent lieu à un épanouissement plus large du fait de la présence, dans cette zone, de forts gradients de densité et de vitesse. Par ailleurs, la température maximale est calculée avec une grande précision, puisque le modèle de combustion adopté considère une chimie détaillée. L'effet de l'intensité de la turbulence, à l'entrée du co-courant, s'est avéré non négligeable sur le comportement de la flamme. En effet, on remarque qu'une turbulence plus intense à l'entrée a pour effet de raccourcir légèrement la longueur de la flamme. Cela confirme le résultat qu'une turbulence plus intense entraîne une augmentation de la vitesse de

propagation du front de la flamme et donc une flamme moins allongée comme la représente la position du maximum de la température, dans la première station  $x = 80\text{mm}$  de la figure 6.6. Elle se trouve à la distance  $R = 6\text{mm}$  avec une valeur de  $1600\text{ K}$  dans le cas sans générateur de turbulence, par contre, avec un générateur de turbulence du co-courant elle se trouve au rayon  $R = 5\text{mm}$  et  $T = 1370\text{ K}$  (figure 6.7).

De plus, l'intensité de turbulence agit également sur le temps de séjour des gaz dans la région de recirculation par la formation et le développement des tourbillons. Cette influence est aussi remarquée sur le temps de mélange qui est supposé très court en comparaison avec le temps nécessaire aux réactions chimiques (Borghi et al.). En conséquence, la présence d'un générateur de turbulence provoque une diminution de température des gaz brûlés.

Pour l'espèce  $\text{H}_2$ , les résultats sont en bon accord avec les valeurs mesurées par Hwang et al [4]. La valeur maximale de la fraction massique du combustible se trouve dans la zone de la flamme au niveau de la sortie du jet alors qu'elle est pratiquement nulle dans le prémélange des gaz frais. Seulement dans la présence d'un générateur de turbulence, la consommation du combustible est plus rapide. Elle passe d'une valeur proche de 0.17 dans la position  $x = 180\text{mm}$ , figure 6.8, à une valeur de 0.10 dans la présence d'un générateur de turbulence dans la même position Figure 6.9, ce qui signifie que le temps de mélange est devenu très court.

Les évolutions radiales de la fraction massique de  $\text{H}_2\text{O}$  sur les figures 6.12 et 6.13 sont comparables à celle de la température. Une bonne adéquation est obtenue entre les calculs et les résultats expérimentaux avec toutefois le même épanouissement radial dans toutes les distances égales ou supérieures à  $x = 60\text{ mm}$ .

Suivant la figure 6.6, et dans la position  $x = 60\text{mm}$  le maximum de température se trouve au  $R = 6\text{mm}$ , et dans la figure 6.10 avec la même position, la fraction molaire de l'espèce  $\text{O}_2$  a une valeur de 0.10, c'est pour cela que le taux de formation de l'espèce  $\text{NO}$  est élevé dans la position

$x = 60\text{mm}$ , il est formé à partir de l'azote moléculaire de l'air, la réaction  $N_2 + O \underset{k-1}{\overset{k+1}{\rightleftharpoons}} NO + N$  est l'état limitant de ce mécanisme. Cette réaction présente une énergie d'activation élevée, elle ne sera donc rapide qu'à haute température et se déroulera dans le front de flamme. Par contre dans la figure 6.15 où le générateur de turbulence est présent, la réduction du taux de formation de l'espèce NO est significative, le maximum de température est diminué. Ce maximum se trouve ou à  $R = 5\text{ mm}$  avec une fraction molaire de l'espèce  $O_2$  égale à 0.5 ( figure 6.11). Cela provoque la diminution de la formation du NO qui passe de 45 ppm ( figure 6.14) à 15 ppm ( figure 6.14) dans la première station  $x = 60\text{mm}$ , et d'une valeur de 30 ppm à 13 ppm à une distance de  $x = 180\text{mm}$  de l'injection, alors que dans la dernière position  $x = 300\text{mm}$  elle passe de 15 ppm ( figure 6.14) à 3 ppm ( figure 6.14).

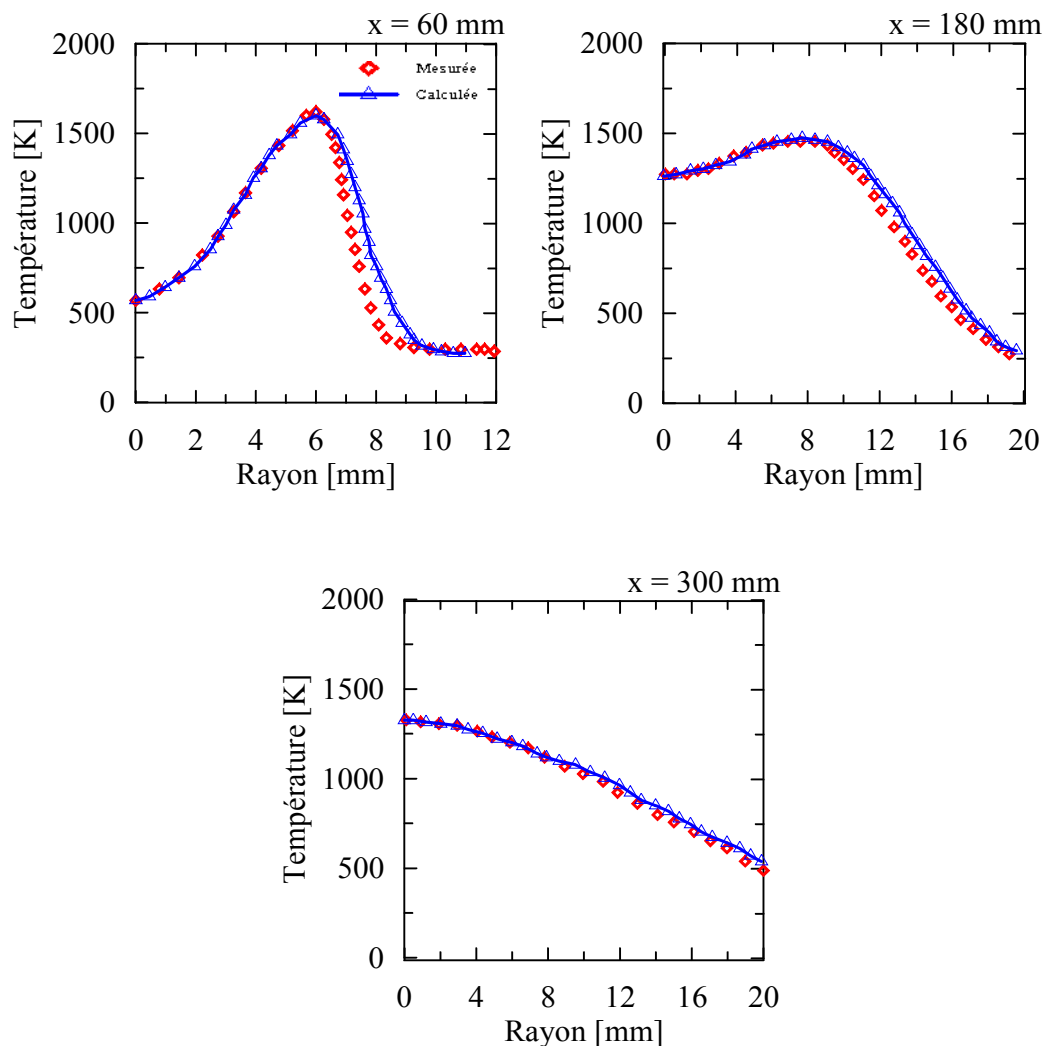


Figure 6.6 Profil radial de la température dans différentes sections  $x$  dans le champ d'écoulement (sans générateur de turbulence)

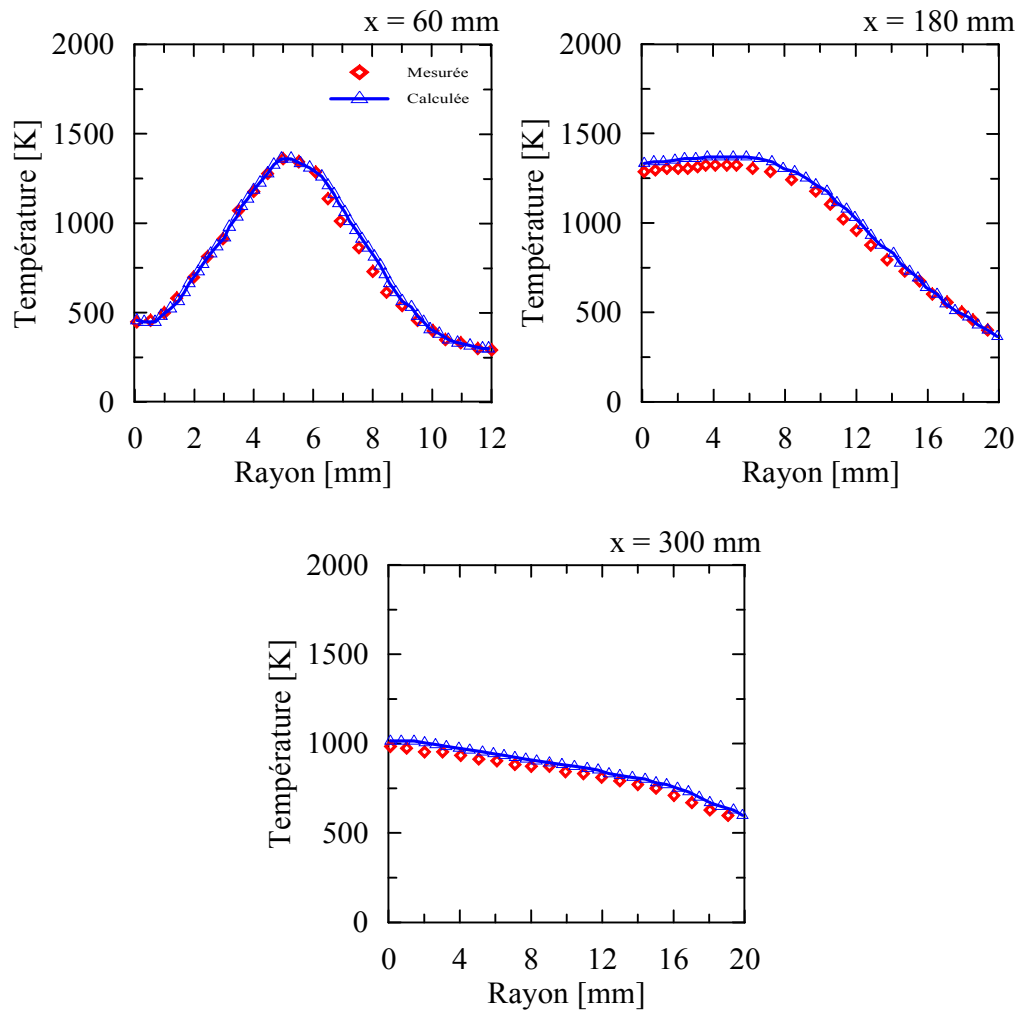
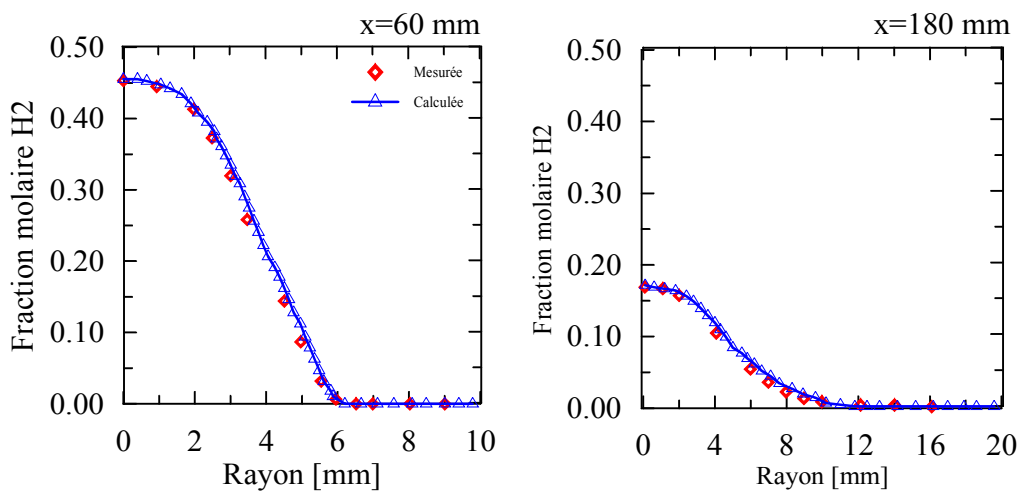


Figure 6.7 Profil radial de la température dans différentes sections  $x$  dans le champ d'écoulement (avec un générateur de turbulence)



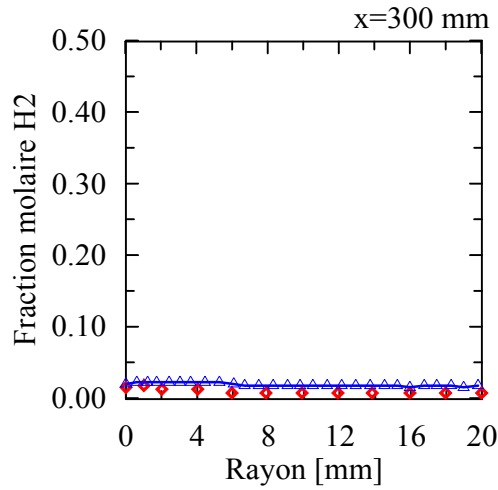


Figure 6.8 Fraction molaire de l'espèce H<sub>2</sub> dans différentes sections x dans le champ d'écoulement (sans générateur de turbulence)

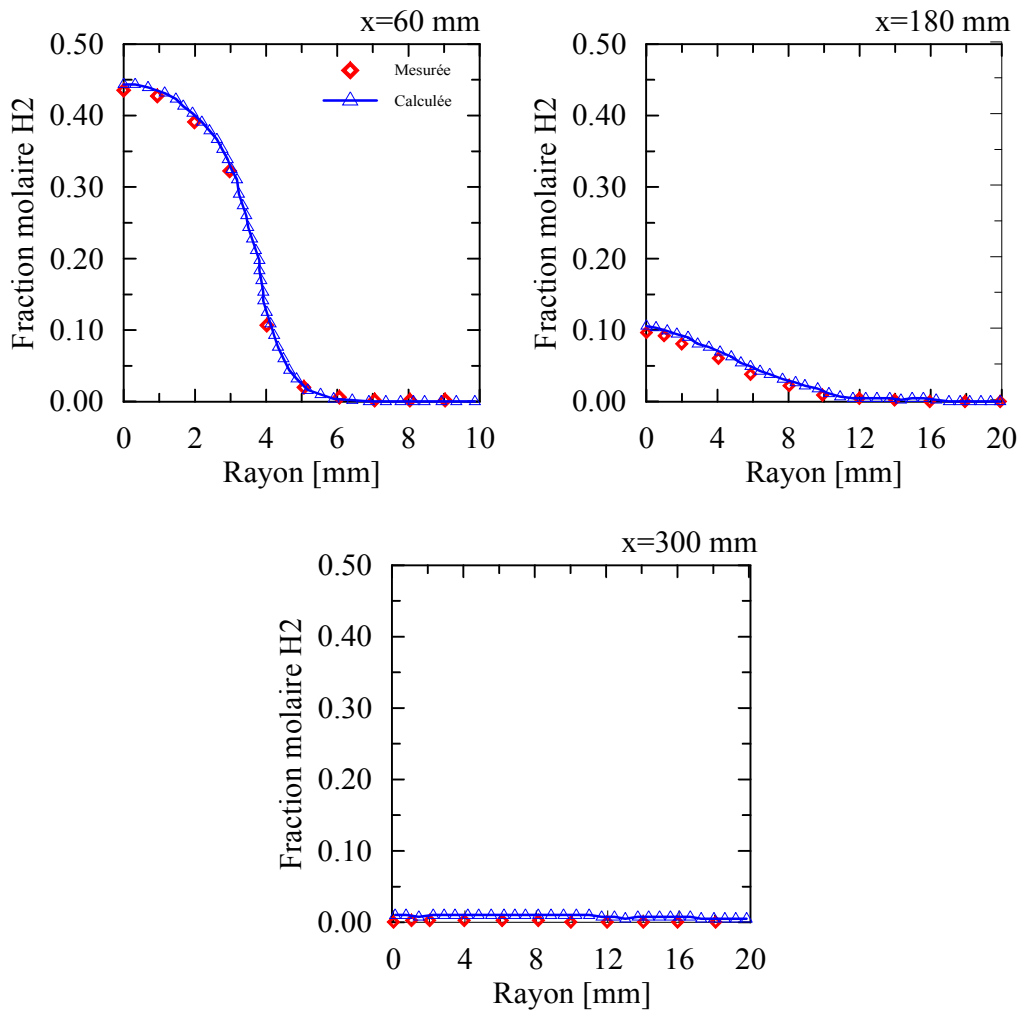


Figure 6.9 Fraction molaire de l'espèce H<sub>2</sub> dans différentes sections x dans le champ d'écoulement (avec un générateur de turbulence)

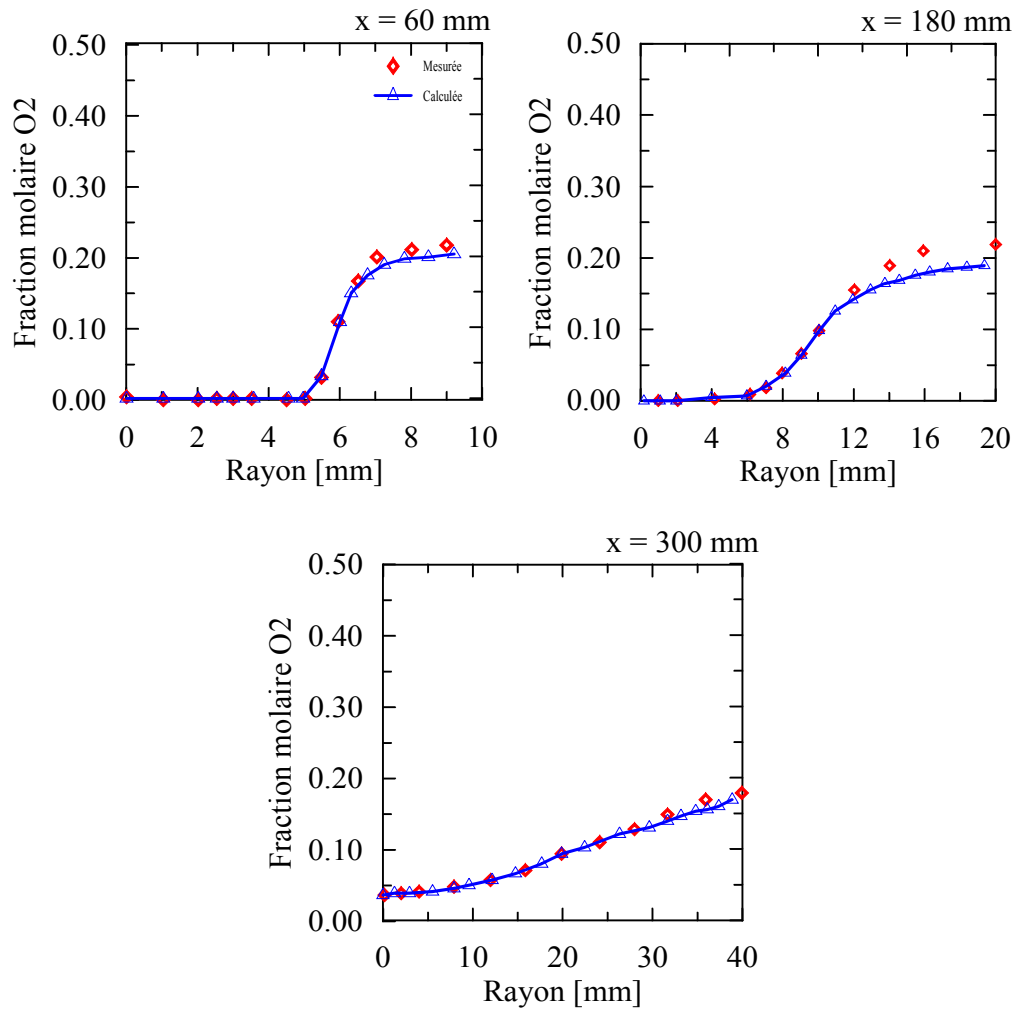
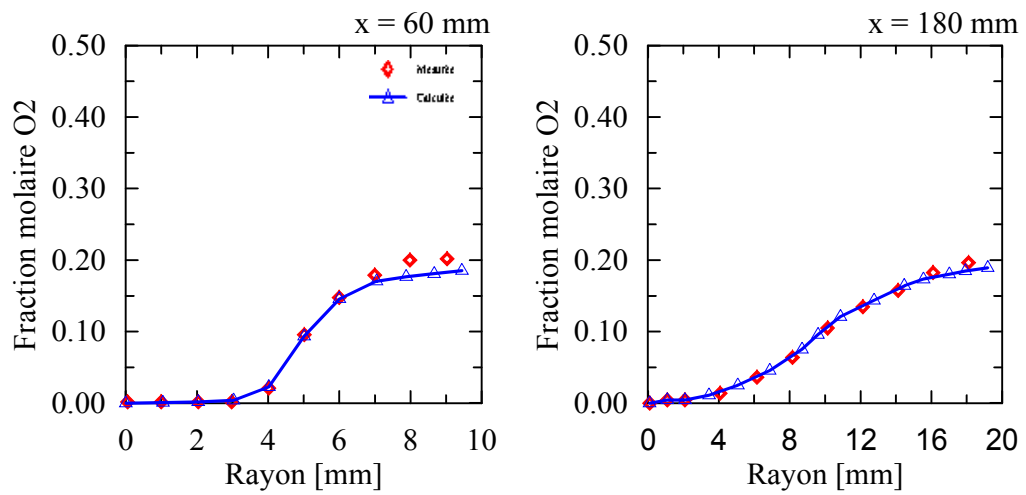


Figure 6.10 Fraction molaire de l'espèce  $O_2$  dans différentes sections  $x$  dans le champ d'écoulement (sans générateur de turbulence)



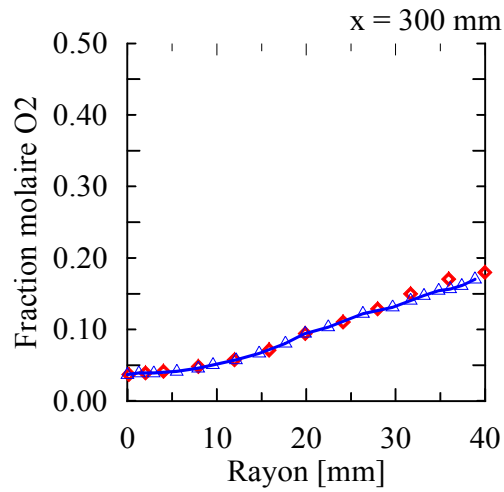


Figure 6.11 Fraction molaire de l'espèce  $O_2$  dans différentes sections  $x$  dans le champ d'écoulement (avec un générateur de turbulence)

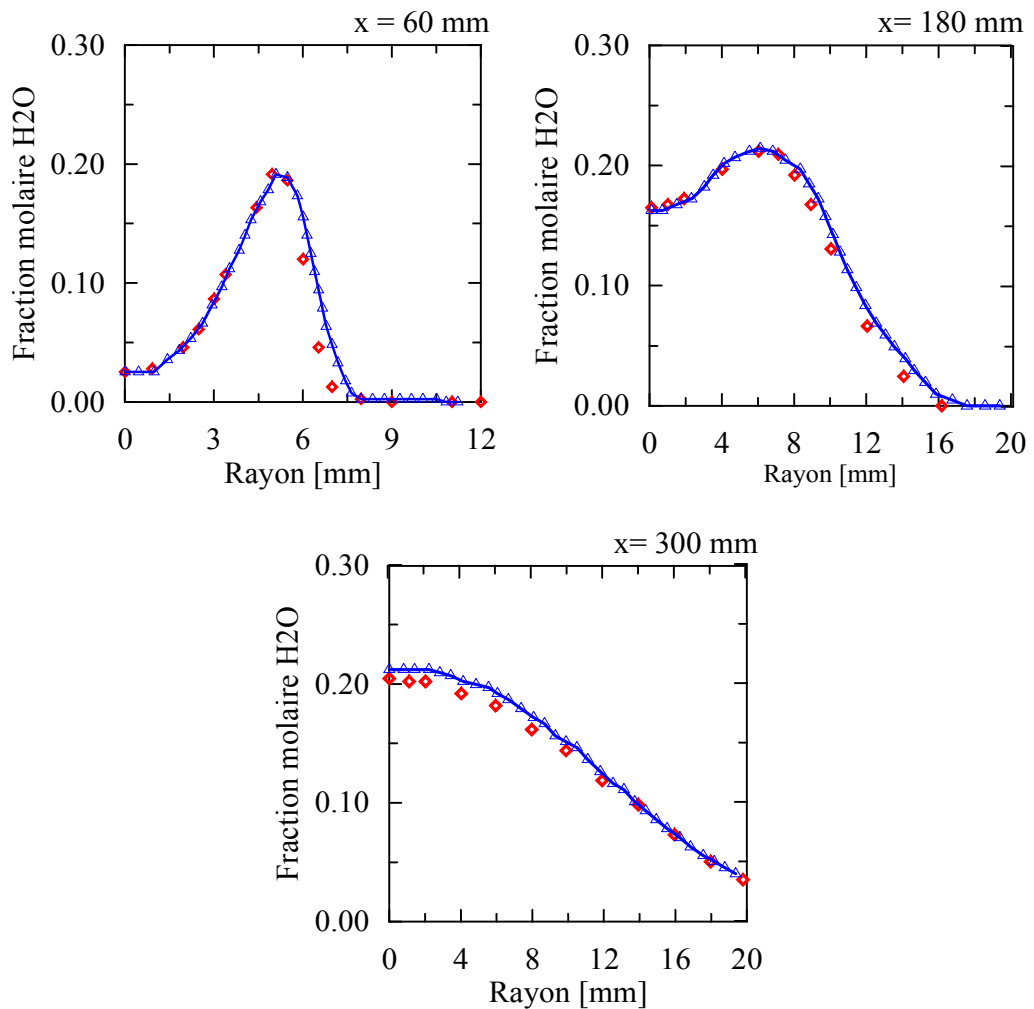


Figure 6.12 Fraction molaire de l'espèce  $H_2O$  dans différentes sections  $x$  dans le champ d'écoulement (sans générateur de turbulence)

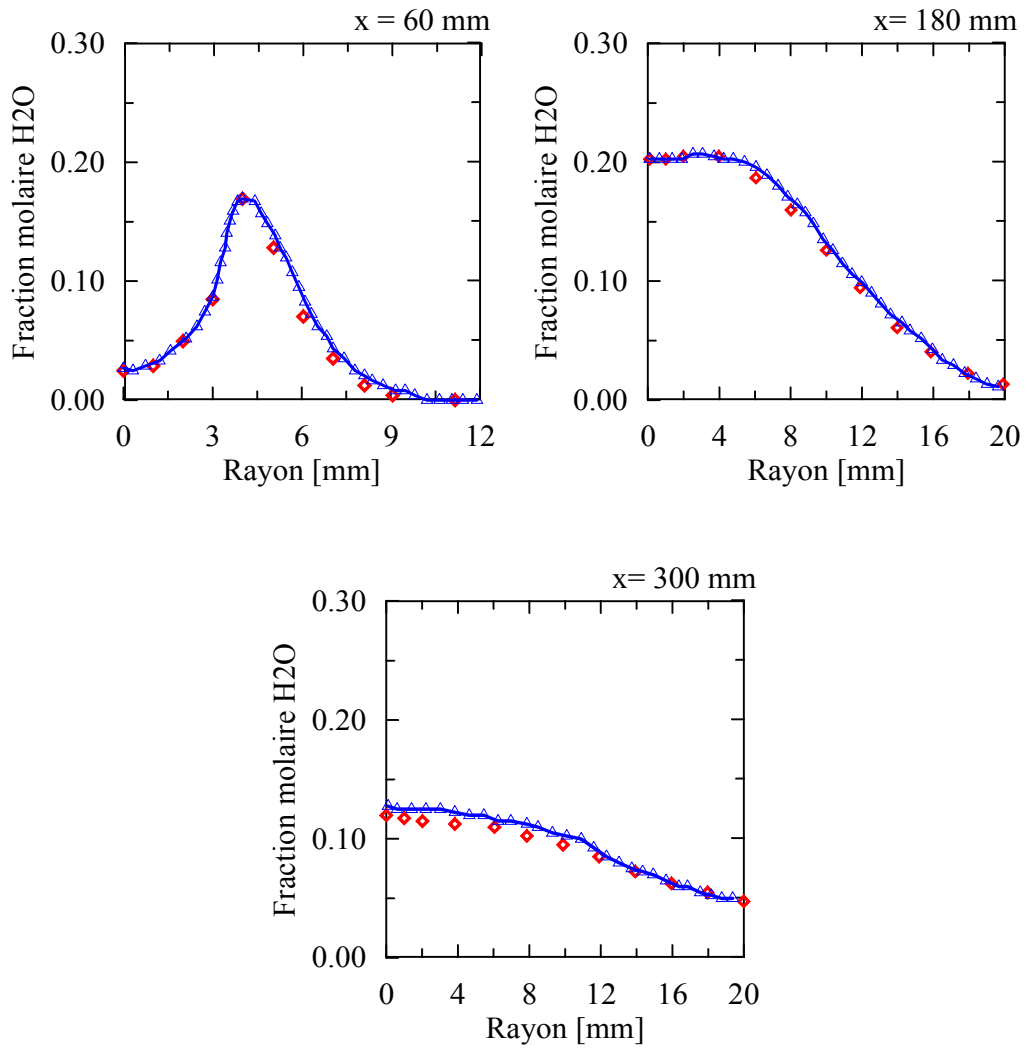
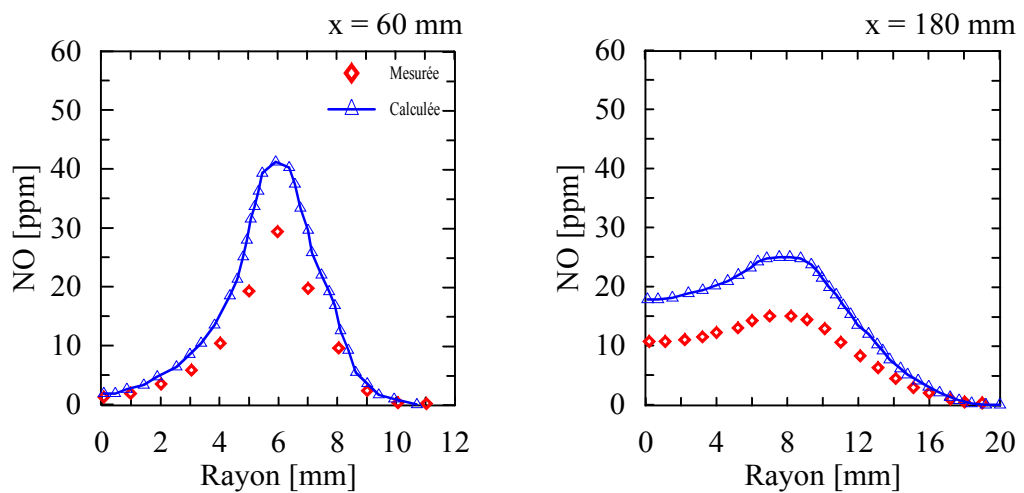


Figure 6.13 Fraction molaire de l'espèce H<sub>2</sub>O dans différentes sections  $x$  dans le champ d'écoulement (avec un générateur de turbulence)



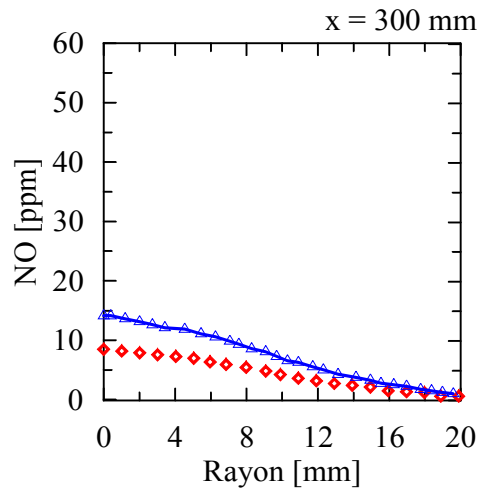


Figure 6.14 Profil radial de l'espèce NO dans différentes sections x dans le champ d'écoulement (sans générateur de turbulence)

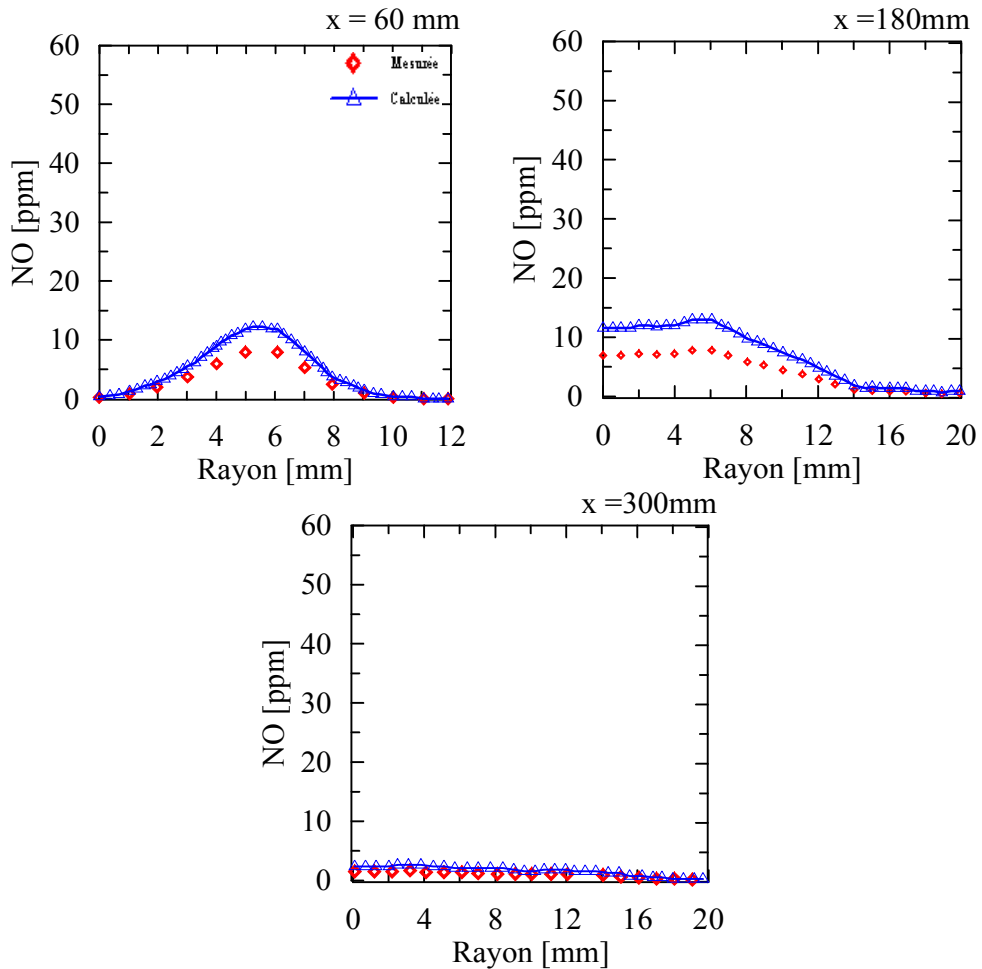


Figure 6.15 Profil radial de l'espèce NO dans différentes sections x dans le champ d'écoulement (avec générateur de turbulence)

## 6.2 Deuxième cas (Flamme de diffusion turbulente CH<sub>4</sub>/Air)

### 6.2.1 Description du problème physique et conditions aux limites

La configuration de la flamme de diffusion utilisée dans ce travail se compose d'un jet principal (25 %CH<sub>4</sub> et 75 %N<sub>2</sub>) qui est issu d'un injecteur de diamètre 7,2 mm avec un nombre de Reynolds de 22400 et une vitesse moyenne 49.6 m/s, et une température 294 K, entouré d'une flamme pilote de diamètre 18.2 mm et de fraction de mélange 0.27 et une vitesse moyenne 11.4 m/s d'une température de 1800K. Ces deux jets sont entourés par un co-courant d'air entrant dans une enceinte cylindrique axisymétrique avec une vitesse moyenne 1 m/s et une température de 291 K.

Cette enceinte représente une chambre de combustion de 0,5 m de diamètre et une longueur de 2 m ( figure 6.16)[4].

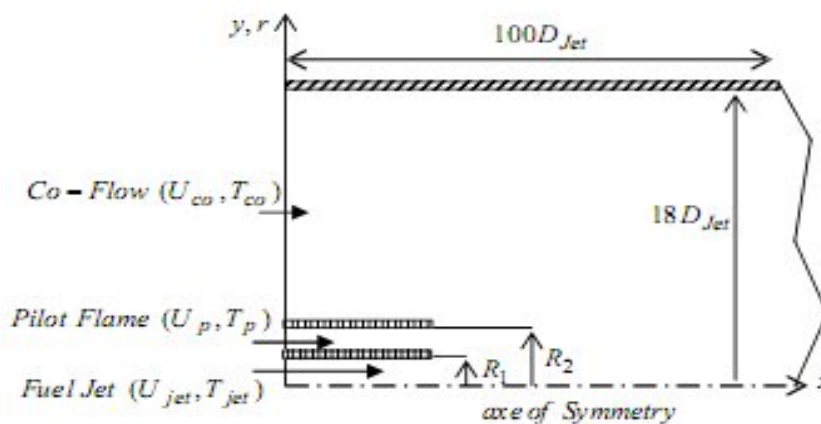


Figure. 6.16 Configuration géométrique du problème.

Pour les conditions aux limites, l'énergie cinétique de turbulence du flux d'air ( figure 6.18 ) et son taux de dissipation sont exprimés par:

$$\bar{k} = 2 \left( \bar{u}'^2 + 2 \bar{v}'^2 \right) \quad \varepsilon = \frac{\bar{k}^{3/2}}{0.3 D_h}$$

◇ A l'entrée de jet principal ( $x = 0$ ):

$$r < R_{f1} : \rho = \rho_{f1}, T = T_{f1}, U = U_{f1} \text{ (figure 6.17), } v = 0, Y_i = Y_{f1} \text{ avec } i = 1,2,n$$

◇ A l'entrée de jet secondaire ( $x = 0$ ):

$$R_{f1} < r < R_{f2} : \rho = \rho_{f2}, T = T_{f2}, U = U_{f2} \text{ (figure 6.17), } v = 0, Y_i = Y_{f2} \text{ avec } i = 1,2,n$$

◇ A l'entrée d'air :

$$R_{f2} < r < R_a : \rho = \rho_a, T = T_a, U = U_a \text{ (figure 6.17), } v = 0, Y_i = Y_a \text{ avec } i = 1,2,n$$

◇ A la sortie ( $x = 2 \text{ m}$ ) :

$$v = 0, \frac{\partial u}{\partial x} = 0, \frac{\partial Y_i}{\partial x} = 0, \frac{\partial T_i}{\partial x} = 0 \text{ avec } i = 1,2,n$$

◇ Sur l'axe de symétrie, les conditions suivantes sont imposées :

$$v = 0, \frac{\partial u}{\partial x} = 0, \frac{\partial Y_i}{\partial r} = 0, \frac{\partial T}{\partial r} = 0, \frac{\partial \rho}{\partial r} = 0 \text{ avec } i = 1,2,n$$

◇ Sur les parois de la chambre la condition de non glissement est appliquée

$$(r = R_c, 0 < x < 2m) :$$

$$u = v = 0, T = T_{paroi}, \frac{\partial Y_i}{\partial r} = 0, \text{ avec } i = 1,2,n$$

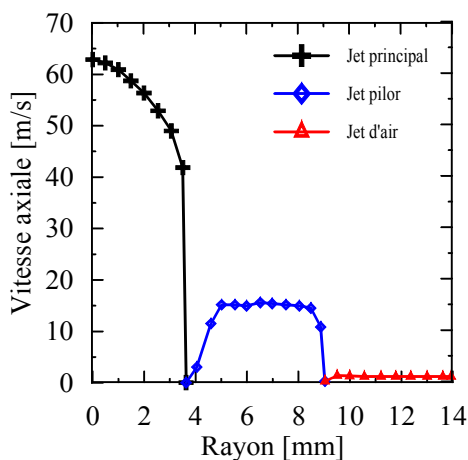


Figure 6.17 Profil de vitesse des jets

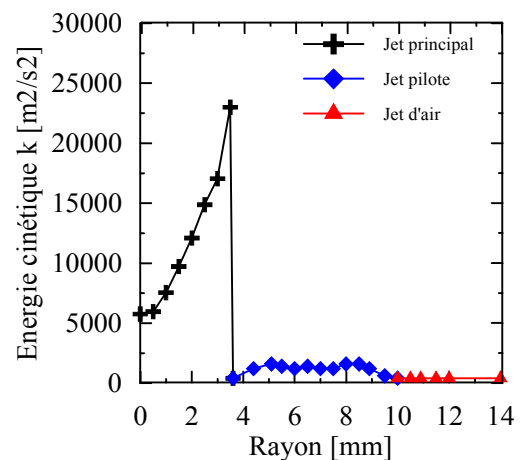


Figure 6.18 : Profil de Energie cinétique K des jets

## 6.2.2 Résultat et discussion

### 6.2.2.1 Validation de la procédure de calcul

La figure 6.19 montre les profils de la fraction de mélange et de la température le long de la ligne centrale de la flamme. La décroissance axiale de la fraction de mélange est bien reproduite et les températures mesurées sont estimées avec une précision raisonnable. Cependant, la fraction de mélange et la température sont légèrement sous-estimées entre  $x = 100$  mm et  $350$  mm  $x =$  qui peut être liée à des incertitudes dans le profil de vitesse d'entrée.

Ces résultats montrent que le calcul par l'approche des flammelette et le modèle  $k-\varepsilon$  prédit correctement la forme de la flamme, et la distribution de la température.

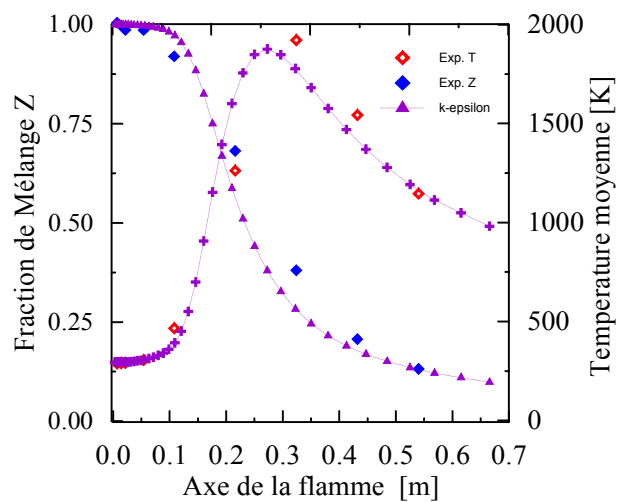


Figure. 6.19 Profil axial de la fraction de mélange et la température de la flamme

6.2.2.2 Etude de l'effet de dilution par le CO<sub>2</sub> sur le champ thermique

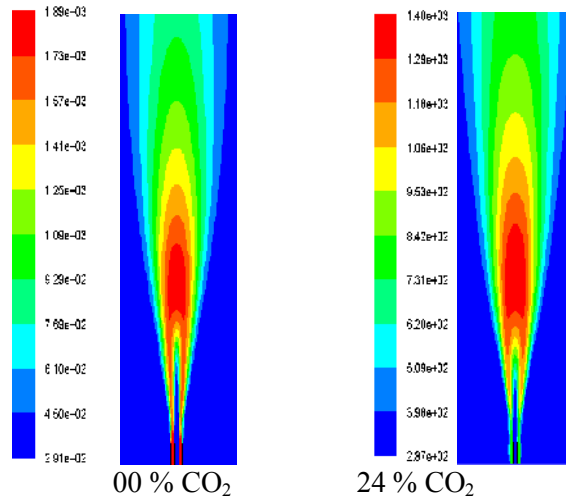


Figure. 6.20 Effet de dilution sur la température

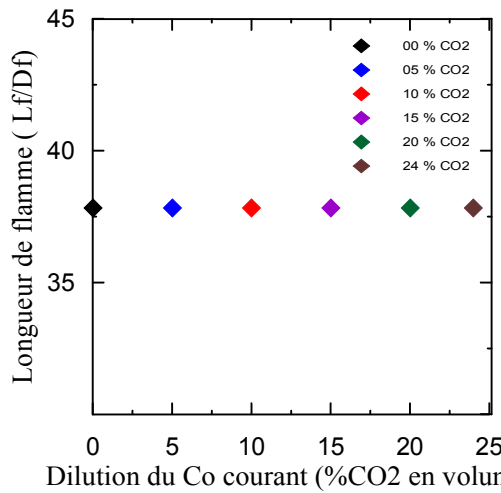


Figure 6.21 Effet de dilution sur la longueur de la flamme

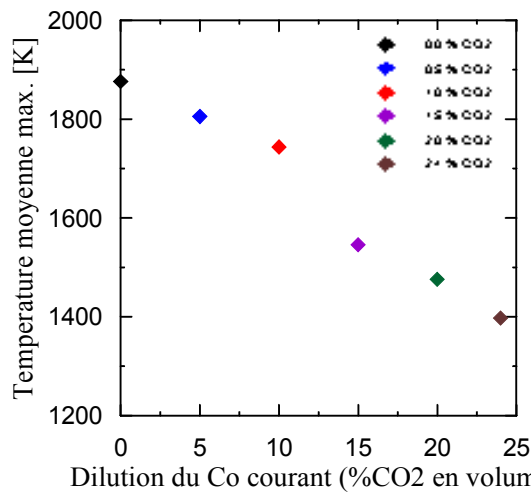


Figure. 6.22 Effet de dilution sur la température maximale de la flamme

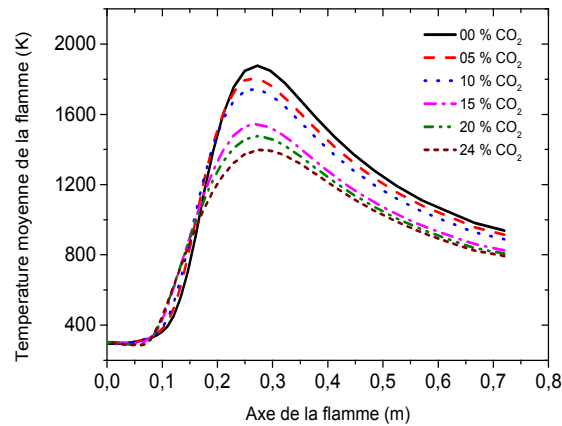


Figure. 6.23 Profil de la température sur l'axe de symétrie.

La figure 6.20 illustre les contours de température pour le premier cas où le pourcentage de dilution par le CO<sub>2</sub> est nul, et le dernier cas avec une dilution de 24 % de CO<sub>2</sub> qui représente l'extinction de la flamme. On constate que la longueur de flamme n'est pas changée puisqu'on n'a pas modifié la géométrie et les conditions aux limites (figure 6.21) ; par contre le maximum de la température diminue de 1876 K à 1397 K (Figure 6.22).

La figure 6.21 montre que la position du pic de température axiale  $x_{T_{max}}$ , utilisée pour la détermination de la longueur de flamme  $L_f$  ( $L_f = x_{T_{max}}$ ), garde la même position axiale avec l'augmentation de dilution. Contrairement à la longueur de la flamme, le maximum de température diminue en fonction du CO<sub>2</sub> ajouté de l'ordre de 25%.

La figure 6.23 représente les profils axiaux de température pour les différents pourcentages de dilution par l'espèce CO<sub>2</sub>. On note que l'évolution axiale de température garde la même allure pour les cinq cas.

La dilution n'affecte pas les profils axiaux dans la zone proche de la sortie de la buse centrale de méthane, par contre son effet se manifeste surtout à partir de  $x > 0,2m$ .

6.2.2.3 Etude de l'effet de dilution par le CO<sub>2</sub> sur le champ des espèces

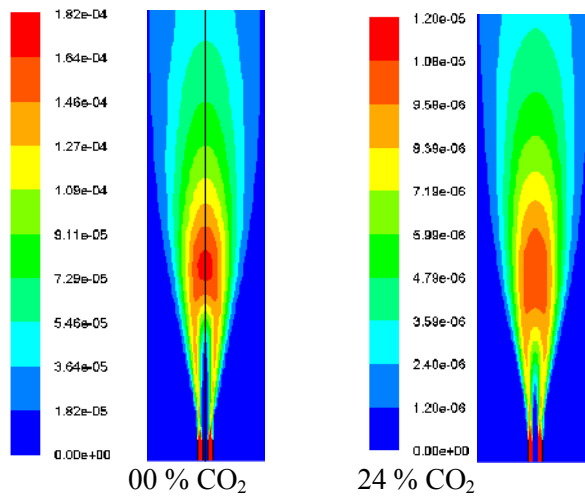


Figure. 6.24 Effet de dilution sur la réduction de NO

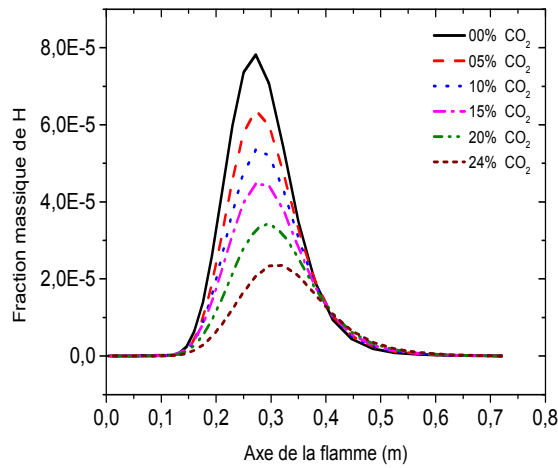


Figure. 6.25 Profil de la fraction massique de H sur l'axe de symétrie

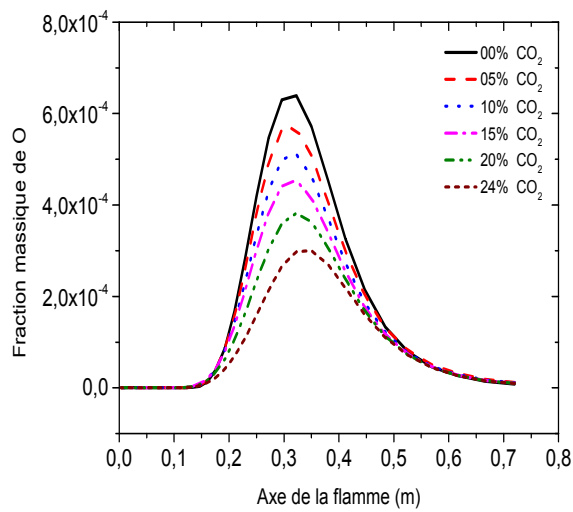


Figure. 6.26 Profil de la fraction massique de O sur l'axe de symétrie.

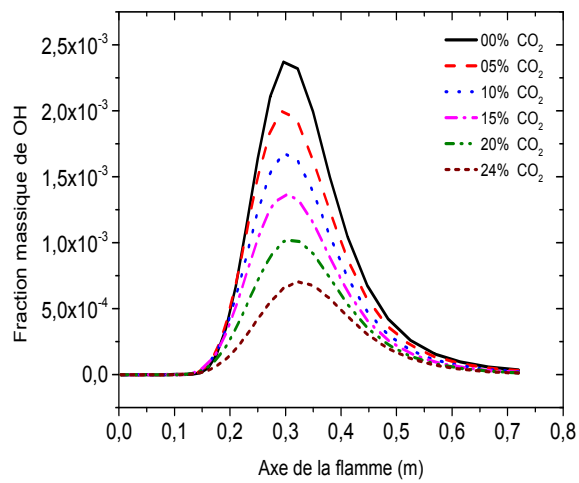


Figure. 6.27 Profil de la fraction massique de OH sur l'axe de symétrie.

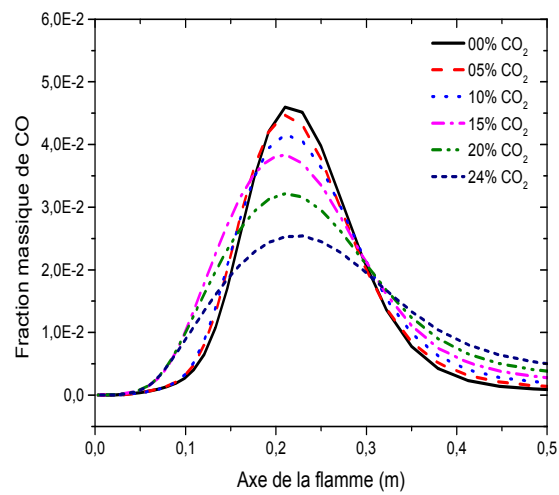


Figure. 6.28 Profil de la fraction massique de CO sur l'axe de symétrie.

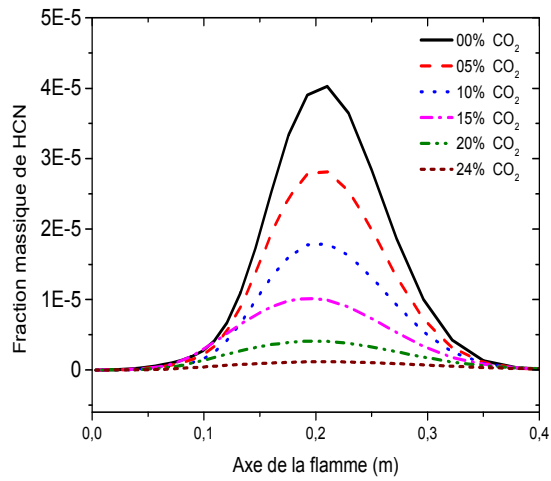


Figure. 6.29 Profil de la fraction massique de HCN sur l'axe de symétrie

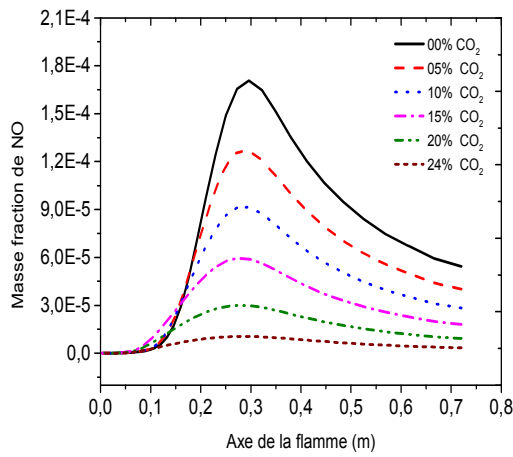


Figure. 6.30 Profil de la fraction massique de NO sur l'axe de symétrie.

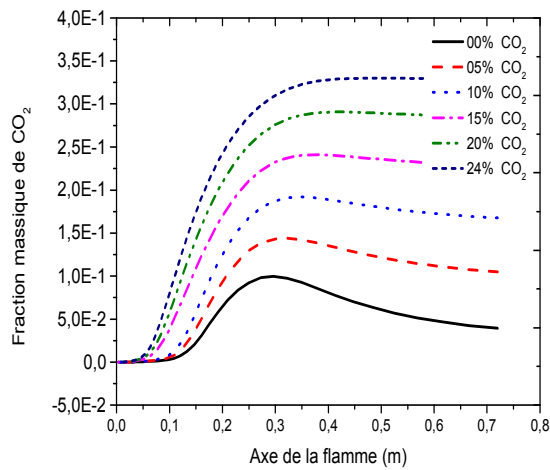


Figure. 6.31 Profil de la fraction massique de CO2 sur l'axe de symétrie.

On remarque que les variations les plus importantes se font autour le point  $x = 272$  mm, c'est-à-dire aux maximum des variables. C'est la zone du front de flamme ( $T=T_{\max}$ ).

Les espèces inexistantes dans le mélange tels que le  $H_2O$ ,  $OH$ ,  $CO$  et le  $HCN$  vont progressivement apparaître et augmenter pour atteindre des valeurs maximales dans la zone de réaction comme les montrent les profils ( figures 6.25, 6.26, 6.27, 6.28 et 6.29), le comportement de leur fractions massiques est similaire, L'effet de la dilution par le  $CO_2$  est très significatif pour les différentes espèces, il engendre une réduction importante. Pour l'espèce  $H$  (figure 6.25) la diminution est de l'ordre de 73 %, pour l'espèce  $O$  (figure 6.25) elle est de l'ordre de 60%, pour les espèces  $OH$  et  $CO$  se réduisent presque avec le mêmes taux figure 6.27 et figure 6.28.

Dans le front riche des flammes, les radicaux carbonés( $CX$ ) peuvent facilement rompre la molécule d'azote suivant la réaction  $N_2 + \dot{C}H \rightarrow \dot{N} + HCN$  avec une énergie d'activation de 50 Kcal/mole. C'est pour cela l'espèce  $HCN$  ( figure 6.29 ) se forme dans une zone très étroite sur l'axe de la flamme avec une croissance importante, puis elle se dissocie rapidement avec la diminution de la température.

Le monoxyde d'azote va apparaître et augmenter progressivement à partir du point  $x = 150$  mm pour atteindre des valeurs maximales dans la zone de réaction comme le montrent la Figure 6.30, en aval du front de flamme, la concentration de cette espèce diminue pour atteindre sa valeur normale à la sortie. La concentration de l'oxyde d'azote diminue de 93 % lorsque le  $CO_2$  de 24% dans le comburant (figure 6.24).

Le profil axial de l'espèce  $CO_2$  représenté par la figure 6.31, montre la progression de cette dernière puisqu'on ajoute chaque fois le  $CO_2$  jusqu'elle atteint un maximum, et garde presque une valeur normale à la sortie.

#### 6.2.2.4 L'effet chimique de $CO_2$

L'effet chimique du  $CO_2$  est étudié dans les figures 6.32, 6.33 à la pression atmosphérique aux différents pourcentage de dilution. Une espèce inerte artificielle  $X$ , qui a les propriétés semblables

(transport, rayonnement et thermochimique) à celle du  $\text{CO}_2$  est présentée pour caractériser les effets chimiques de  $\text{CO}_2$  sur la structure et les émissions de flamme. En conséquence, la différence entre les propriétés calculées de flamme avec l'espèce artificielle X et le  $\text{CO}_2$  est dû aux effets chimiques du  $\text{CO}_2$  supplémentaire.

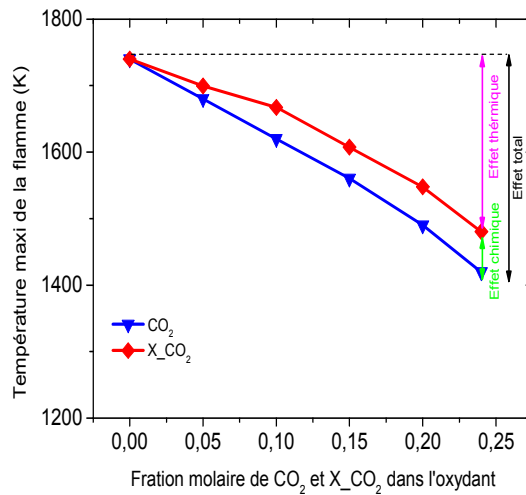
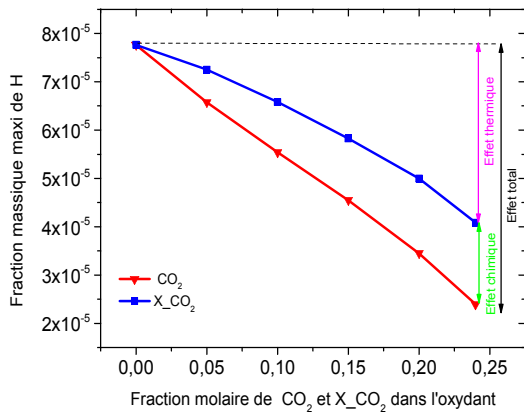
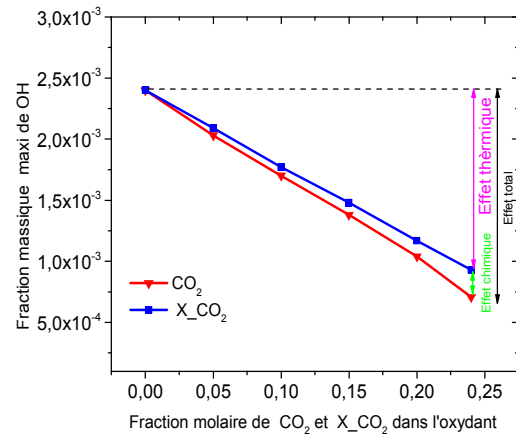


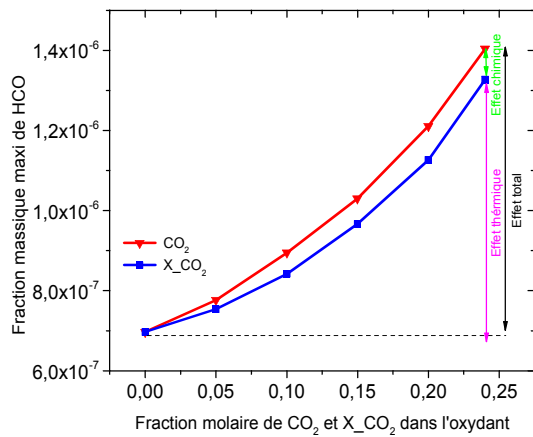
Figure. 6.32 Effet chimique de l'ajout du  $\text{CO}_2$  sur le maximum de température dans l'axe de symétrie.



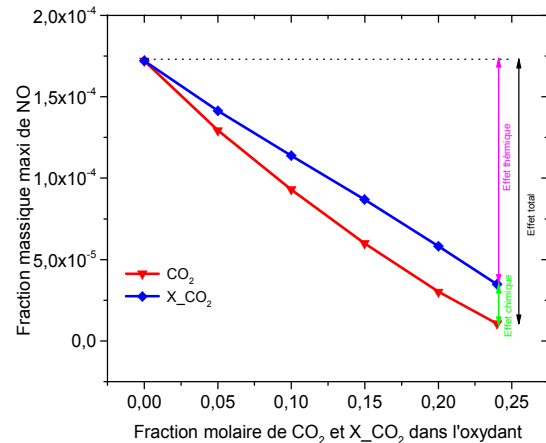
(a) Fraction massique de H.



(b) Fraction massique de OH.



(b) Fraction massique de HCO.



(c) Fraction massique de NO.

Figure. 6.33 Effet chimique de l'addition du CO<sub>2</sub> sur le maximum des différentes espèces chimiques

La température est très affectée par le CO<sub>2</sub> (figure. 6.32), elle son taux de réduction est de 79% ; ce qui représente l'effet thermique du CO<sub>2</sub>. Quand l'espèce artificielle est présentées, la température est augmentée de 15% ; ce qui représente l'effet chimique.

Les figures 6.33 (a) et 6.33 (b) représentent les précurseurs de la combustion, espèces H et l'OH qui sont très affectés par le CO<sub>2</sub> par l'intermédiaire de la réaction  $\text{CO}_2 + \text{H} \rightleftharpoons \text{CO} + \text{OH}$ . Tout en ajoutant le CO<sub>2</sub> de 0 à 24%, le radical H est réduit de 69% dans lequel 41% est dû à l'effet chimique et 59% est provoqué par effet thermique. L'espèce OH est réduite de 70% dans lequel 24% est attribué à l'effet chimique et 76% à l'effet thermique.

La figure 6.33 (b) représente l'évolution de l'espèces HCO, qui n'est pas affectée par le CO<sub>2</sub>. La réaction la plus importante de la production de HCO est  $\text{CO}_2 + \text{CH} \rightleftharpoons \text{CO} + \text{HCO}$ , il peut voir que cette espèce est produite par des effets thermiques et chimiques.

Le profil du NO thermique est représenté par la figure 6.33 (d) qui est produit selon la réaction dominante  $\text{N} + \text{OH} \rightleftharpoons \text{NO} + \text{H}$ , il est affecté par le CO<sub>2</sub> indirectement, par le moyen de l'OH, qu'il prend sa manière, avec une réduction de 85% par effet thermique et de 15% par l'effet chimique.

## Bibliographie

1. Schneider, Ch. et al. (2003). **Flow field measurements of stable and locally extinguishing hydrocarbon-fuelled jet flames**, Combustion and Flame (135), 185–190.
2. . Mamerie, A. (2009). **Etude numérique de la combustion turbulente du prémélange pauvre méthane/air enrichi à l'hydrogène**. Thèse de doctorat, Université d'Orléans, France.
3. Hwang, C-H.; Seungro, L.; et Lee, C-E. (2008). **The effect of turbulence intensity of ambient air flow on NOx emissions in H2/air non premixed jet flames**. International Journal of Hydrogen Energy, 33(2), 832-841.
4. <http://www.sandia.gov/TNF/pilotedjet.html>

## 7. Conclusion Générale

Ce travail de recherche vise à améliorer la connaissance et la compréhension des phénomènes mis en jeu lors d'un processus de combustion turbulente en milieu non pré mélangé. En particulier, notre but était de modéliser par le concept de flammelette laminaire une flamme de diffusion turbulente  $H_2$ /Air entouré d'un co-courant d'air plus intense, pour le premier cas. On y découvre que la largeur moyenne de la flamme est devenue plus petite comme cela a été démontré à travers les profils radiaux de température. Toute fois, la zone de réaction de flamme, représentée par la région de coexistence de l'hydrogène et de l'oxygène, devient plus large en raison d'un meilleur mélange résultant de l'augmentation de l'intensité de la turbulence qui réduit les pics de température dans la zone de combustion. On remarque aussi le temps de séjour des gaz dans la zone des hautes températures et la concentration d'oxygène dans la zone de combustion ainsi que le taux de formation de l'espèce NO sont réduits.

Le deuxième cas pour objectif d'apporter des connaissances physiques à la compréhension du comportement d'une flamme turbulente de diffusion modélisé toujours par le concept de flammelette laminaire  $CH_4$ /Air assisté par un co-courant d'air dilué au dioxyde de carbone ( $CO_2$ ). Largement présent dans la sécurité incendie et les foyers industriels à recirculation (interne ou externe) des produits de combustion, l'influence de la dilution du comburant a cependant été peu étudiée en termes de phénomènes transitionnels capables d'articuler l'ensemble des régimes de combustion obtenus en un continuum de réponses. Or l'effet de la dilution par le  $CO_2$ , jusqu'à l'extinction de la flamme, montre une modification significative des espèces chimiques dominantes et les émissions polluantes. L'ajout du diluant agit alors de manière passive sur l'équilibre du schéma cinétique. Ainsi, l'addition de  $CO_2$ , même en quantité réduite provoque la diminution de  $NO_x$ , en particulièrement l'impact de l'effet chimique sur les espèces dominantes est très important.

## Perspectives

A ce fait l'ensemble de ces résultats pourraient être complétés par les éléments suivants :

- Dilution par le  $\text{CO}_2$  à côté du combustible.
- Dilution par le  $\text{H}_2\text{O}$  à côté du combustible et comburant.
- Dilution par le  $\text{N}_2$  à côté du combustible et comburant.
- Dilution par le  $\text{CO}_2 + \text{Ar}$  à côté du combustible et comburant.

## Résumé

Ce travail s'intéresse à la compréhension du comportement des flammes de diffusion turbulente issues d'un jet de combustible assisté par un coflow d'air de deux configurations différentes modélisés par le concept de flammelette laminaire. Or ce modèle joue un rôle important dans la modélisation de la combustion turbulente non pré mélangée, Il décrit l'interaction de la chimie avec la turbulence à la limite des réactions rapides. L'avantage principal de ce modèle est l'information détaillée du procédé de transport moléculaire et la cinétique des espèces chimiques qui y sont incluses, ainsi que les effets de la turbulence ont été modélisés par le modèle à deux équations de transport ( $k-\varepsilon$ ), avec une correction de Pope limité.

La première configuration est de définir les effets de l'intensité de turbulence du co-courant avec une vitesse moyenne identique qui est appliqué à une flamme de diffusion turbulente d'hydrogène mélangé avec de l'azote, la diminution de la température de la flamme est examinée ainsi que son impact sur la réduction des émissions de NOx .

La deuxième configuration est une flamme de diffusion turbulente de méthane assisté par un coflow d'air dilué avec du dioxyde de carbone (CO<sub>2</sub>), Le rôle de la dilution sur la longueur de la flamme, la température et les émissions polluantes, et à la fin l'insertion d'une molécule inerte, marquée X\_CO<sub>2</sub> dans le mécanisme réactionnelle qui a les mêmes propriétés physiques que CO<sub>2</sub>, mais elle ne participe à la réaction ; pour déduire l'effet chimique du CO<sub>2</sub> .

## Abstract

This work is interested in comprehension the turbulent diffusion flames behavior resulting from a fuel jet assisted by a coflow of air of two different configurations model by the laminar concept of flamelet. This model plays a significant role in the modeling of diffusion turbulent combustion; it describes the interaction of chemistry with turbulence in extreme cases of the fast reactions. The principal advantage of this model is the detailed information of the molecular process of transport and the kinetics of the chemical species which are included there. The effects of turbulence were modelled by two transport equations ( $k-\varepsilon$ ), with a correction of Pope. The first configuration is defined by turbulence intensity effects of the Co-current with an identical mean velocity which is applied to a turbulent diffusion flame of hydrogen mixed with nitrogen, the reduction in the temperature of the flame is examined like its impact on the reduction of the NOx emissions.

The second configuration is a turbulent diffusion flame of methane assisted by a coflow of air diluted with carbon dioxide (CO<sub>2</sub>), the role of dilution over the length of the flame, the temperature and the polluting emissions. Finally, we insert an inert molecule labeled X\_CO<sub>2</sub> in the mechanism reaction which has the same physical properties that CO<sub>2</sub>, but it does not take part in the reaction to deduce the chemical effect of CO<sub>2</sub>.